

H. P. Schröder

Frankfurt a. M. 1981

Lehrer: Prof. Dr. R. Bass
1. Gutachter: Doz. H. Hille, Ph.D.
2. Gutachter: Prof. R. Drexler, Ph.D.

Tag der mündl. Prüfung:

Tag der Promotion: 30.6.81

UNTERSUCHUNG EINER METHODE ZUR BESCHREIBUNG VON
ENERGETISCH NIEDRIG-LIEGENDEN ZUSTÄNDEN IN KERNEN

Inaugural-Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades der
Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Johann Wolfgang Goethe-Universität
Frankfurt am Main

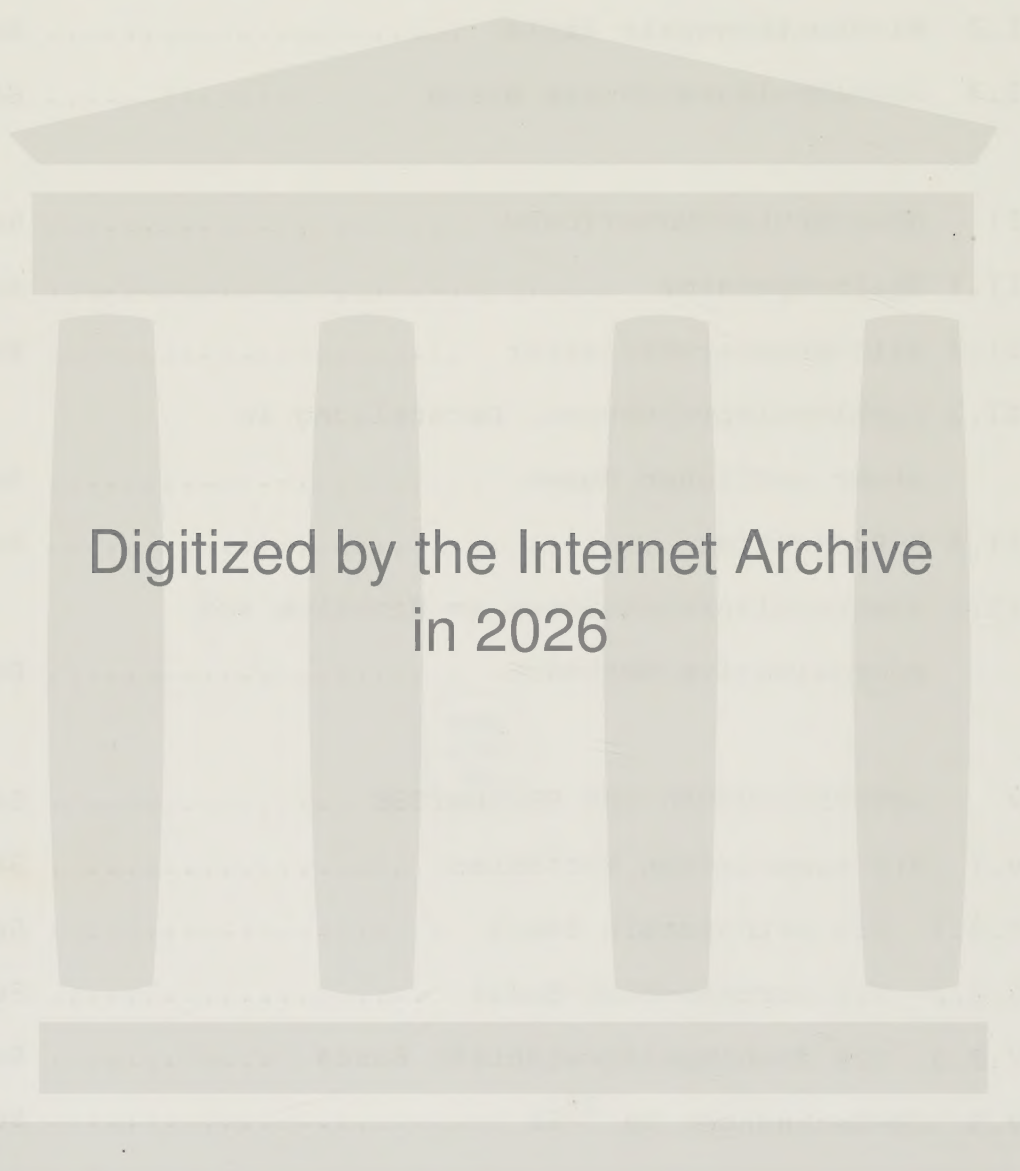
vorlegt von
Hans Peter Schröder

Wiesbaden 1981



INHALTSVERZEICHNIS

I	EINLEITUNG	Seite 5
II	AUFBAU DES KONFIGURATIONSRAUMES	Seite 11
II.1	Orthogonale Basis	Seite 14
II.2	Nichtorthogonale Basis	Seite 17
II.3	Drehimpulsgewichtete Basis	Seite 18
III	DREHIMPULSPROJEKTIONEN	Seite 20
III.1	Shift-Operator	Seite 23
III.2	Hill-Wheeler-Projektor	Seite 25
III.3	Drehimpulsprojektion, Darstellung in einer endlichen Summe	Seite 27
III.4	K-Projektion	Seite 33
III.5	Drehimpulsprojektionen im Hinblick auf approximative Methoden	Seite 36
IV	UNTERSUCHUNGEN UND ERGEBNISSE	Seite 40
IV.1	Die numerischen Verfahren	Seite 41
IV.2.1	Die orthogonale Basis	Seite 46
IV.2.2	Die Hartree-Fock-Basis	Seite 49
IV.2.3	Die drehimpulsgewichtete Basis	Seite 53
IV.3	CM-Rechnungen in ^{28}Si	Seite 79
V	ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK	Seite 85
A I	ANHANG I	Seite 92
A II	ANHANG II	Seite 94
	LITERATURVERZEICHNIS	Seite 100



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550820_0043

I. Einleitung

Die Lösung von Vielteilchenproblemen ist eng verbunden mit der Diagonalisierung eines effektiven Hamilton-Operators in einem ausgewählten Modellraum. In kleinen Vielteilchensystemen und wenn der Modellraum eng begrenzt gewählt werden kann, läßt sich die Diagonalisierung mit Schalenmodell-Diagonalisierungsverfahren bewerkstelligen. So wurden z.B. von E.C. Halbert, J.B. McGrory et al. ¹⁾ eine Serie von Rechnungen in s-d Schalenkernen durchgeführt. Die Eigenzustände, die der Oak Ridge-Code erzeugt, gewinnt man aus CFP-Entwicklungen der Zustände. Sie besitzen gute Drehimpuls- und Isospinsymmetrie, Nachteil dieser Rechnungen ist, daß sie aufwendige Computerrechnungen erfordern, die sie in größeren Modellräumen bald an die Grenzen ihrer Möglichkeiten führen.

Mit Variationsverfahren, die die Eigenfunktionen approximativ beschreiben, ist man in der Lage, auch kompliziertere Vielteilchenprobleme zu behandeln; so erhält man z.B. mit ein-Slater-Determinantenzuständen im Hartree-Fock-Verfahren recht gute Ergebnisse für deformierte Kerne. ²⁾ Allerdings ist auch bekannt, daß die Lösungen von Variationsgleichungen nicht die gleichen Symmetrien besitzen müssen wie die exakten Eigenfunktionen ³⁾.

D.h., zusätzlich zu den Variationen müssen Projektionen auf Symmetrieeigenzustände durchgeführt werden, die meistens umfangreicher sind als die Variationsrechnungen selbst.

Dies gilt ganz besonders für Projektionen vor der Variation (PBV)⁴⁾. Sollen die Wellenfunktionen die Symmetrien des Hamiltonoperators besitzen, so ist nach einer symmetrieangepaßten Überlagerung von Slater-Determinanten zu entwickeln, die die Behandlung des Problems entsprechend kompliziert gestaltet in der Praxis.

Variationsrechnungen mit anschließender Projektion (PAV) auf Symmetrieeigenzustände sind dagegen auf einen größeren Bereich von Vielteilchenproblemen anwendbar⁵⁾. Trotzdem sind die Projektionstechniken - exakt durchgeführt - immer noch so umfangreich, daß eher durch sie als durch die Variationsverfahren die Größe des Modellraumes und der Umfang der noch zu beschreibenden Vielteilchensysteme begrenzt werden.

Beschränkt man sich nicht nur auf die Beschreibung des Grundzustandes eines Vielteilchensystems, sondern will man auch Anregungsbande erfassen, so gewinnen die Überlagerungen verschiedener Konfigurationen an Gewicht. Variationsverfahren, die dies berücksichtigen, sind zusammengefaßt unter dem Begriff "configuration mixing" (CM). CM-Rechnungen sind in der Lage, Teile der Wechselwirkung zu erfassen, die in den Variationsansätzen nicht vertreten sind. Die Wellenfunktion des Gesamtsystems besteht aus Überlagerungen von Slater-Determinanten. Die Entwicklungskoeffizienten erhält man aus Lösungen der Eigenwertgleichung, in dem durch die Slater-Determinanten definierten Unterraum. Dazu müssen die Einteilchenorbitale, aus denen die Slater-Determinanten aufgebaut sind, bekannt sein.

Variiert man diese gleichzeitig mit den Entwicklungskoeffizienten, so ergibt sich das Multi-Configuration-Self-Consistent Field (MCSCF)-Verfahren ⁶⁾. MCSCF-Methoden sind in der Lage, gute Ergebnisse für die angeregten Zustände und den Grundzustand zu liefern. Die Konfigurationen, die in die MCSCF-Rechnungen eingehen, müssen vorher ausgewählt werden. Eine gute Approximation der Zustände findet man verständlicherweise dann, wenn die "wichtigsten" Konfigurationen berücksichtigt werden. Liefert aber umgekehrt MCSCF keine gute Beschreibung des Vielteilchenproblems, so sind die Ursachen nur sehr schwer zu ermitteln. Ausprobieren, welche Konfigurationen wichtig sein können, läßt sich auch nur begrenzt, da der numerische Aufwand in dem MCSCF-Verfahren erheblich ist.

Die Lösungen, die das Verfahren liefert, besitzen außerdem nicht die gewünschten Symmetrien, so daß mit Projektionsmethoden die Symmetrieeigenzustände im Anschluß an die Variation gefunden werden müssen.

Was nützlich sein kann, ist eine Methode, die die Schwierigkeiten der Schalenmodell-Diagonalisierungsverfahren umgeht, deren Ergebnisse gut approximiert, eine Systematik angibt, die keine Vorauswahl der für wichtig gehaltenen Konfigurationen trifft, so daß der Aufbau des Konfigurationsraumes nur unter notwendigen Einschränkungen, und zunächst möglichst frei von a priori Vorstellungen zustande kommt. Die zu generierende Basis soll so viel Information wie möglich von der Dynamik des Vielteilchen-

problems mitbringen.

a) Configuration Mixing (CM)

Ziel dieser Arbeit ist es, die niedrig-liegenden angeregten Zustände von Atomkernen in einem approximativen Verfahren, das computertechnisch einfach zu handhaben ist, systematisch zu erzeugen. Die allgemeine Methode ist wie folgt zu beschreiben: Aus Lösungen verschiedener Sätze von Variationsgleichungen, deren Variationsenergien eine monoton wachsende Folge bilden, wird sequentiell ein Satz von Basiszuständen erzeugt. Als Variationsgleichungen zur Behandlung deformierter Kerne benutzen wir z.B. die Hartree-Fock-Grundzustandsgleichungen und modifizierte Hartree-Fock-Gleichungen. In diesen Kernen beschreiben die Lösungen der Hartree-Fock-Gleichungen relativ gut die intrinsischen Zustände. Die Struktur der Zustände ist festgelegt durch die Dynamik des Systems, da jeder Zustand Lösung der Variationsgleichungen ist. Die gefundenen Zustände werden nach ihren Variationsenergien geordnet und nur die N niedrigsten werden zur Konstruktion des Konfigurationsraumes herangezogen. Dann werden mit Hilfe von Projektionstechniken, die eine exakte Drehimpulsprojektion ermöglichen, die gewünschten Drehimpulskomponenten herausprojiziert. Der N-dimensionale Konfigurationsraum, in dem sich der Kern-Hamilton-Operator exakt diagonalisieren läßt, baut sich auf aus den N J-Komponenten der N Zustände. Die Diagonalisation von $\hat{H}$ erfolgt durch sukzessives Lösen der Eigenwertgleichung ($M = 1, \dots, N$)

$$\sum_{\beta=1}^M \{ \langle \Psi(\alpha) | \hat{H} \hat{P}_{\beta} | \Psi(\beta) \rangle - E \langle \Psi(\alpha) | \hat{P}_{\beta} | \Psi(\beta) \rangle \} a_{\beta} = 0$$

Dies ist auch in großen Modellräumen möglich.

b) Aufbau der Arbeit

In Kapitel II wird die Methode vorgestellt. Im weiteren Verlauf gehen wir auf die verschiedenen Sätze von Variationsgleichungen ein und begründen, weshalb wir sie in unsere Untersuchungen mit einbeziehen.

Das nächste Kapitel ist der Drehimpulsprojektion gewidmet, die einen Schwerpunkt in dieser Arbeit darstellt. Zwei gebräuchliche Techniken stehen am Anfang des Kapitels III. Eine exakte Darstellung des Hill-Wheeler-Projektors, wie er für den Spezialfall axialsymmetrischer Zustände für $K=0$ ⁷⁾ in einer endlichen Summe entwickelt wurde, wird erweitert auf nicht-axialsymmetrische Zustände. Am Ende des Kapitels III werden noch Überlegungen zu approximativen Verfahren der Drehimpulsprojektion angestellt, die für größere Kerne und erweiterte Modellräume notwendig werden. In Kapitel IV geben wir einen Überblick über die numerischen Verfahren. Als ein Modell, das numerisch relativ gut handhabbar ist, haben wir uns ^{20}Ne ausgesucht, das aus einem ^{16}O -core und vier aktiven Nukleonen besteht. Anhand dieses Modells haben wir zunächst das Verhalten der Methoden hinsichtlich der Eigenschaften der verschiedenen Variationsgleichungen untersucht. Die Ergebnisse

werden in den Abbildungen in Kap. IV vorgestellt und diskutiert. Am Ende von Kapitel IV findensich Ergebnisse von Rechnungen in dem erweiterten Vielteilchensystem ^{28}Si . Dabei haben wir nur die Hartree-Fock-Grundzustandsgleichungen als Variationsgleichungen benutzt und das niedrigliegende Eigenwertspektrum der O^+ -Zustände in ^{28}Si untersucht und mit Schalenmodell-Diagonalisierungsrechnungen verglichen.

Kapitel V schließlich faßt die Ergebniss zusammen und gibt einen Ausblick auf Möglichkeiten, die die vorgestellte Systematik anbietet. Im Hinblick auf eine approximative Drehimpulsprojektion, die besonders in großen Vielteilchensystemen, die in ausgedehnten Modellraumrechnungen behandelt werden oder zur Beschreibung von Hochspinzuständen an Bedeutung gewinnt, untersuchen wir das Verhalten von $\langle \phi | \hat{R}(\beta) | \psi \rangle$ und $\langle \phi | \hat{H} \hat{R}(\beta) | \psi \rangle$ als Funktion des Drehwinkels β , deren funktionale Relation im Mittelpunkt verschiedener Näherungsverfahren steht.

II. Aufbau des Konfigurationsraumes

Es ist bekannt, daß Schalenmodell-Diagonalisierungsverfahren in der Praxis auf große Konfigurationsräume nicht mehr anwendbar sind ⁸⁾. Das exakte Eigenwertspektrum für ein Vielteilchensystem in einem größeren Modellraum - Bereich der mittleren und schweren Kerne - zu berechnen, ist nicht zu bewerkstelligen.

Man muß also auf Näherungsverfahren ausweichen. Ist man nur an wenigen tief-liegenden Zuständen des Eigenwertspektrums interessiert und gibt es eine sinnvolle Systematik, die die für das Problem "bedeutenden" 'Konfigurationen' auswählt, so sind Configuration Mixing-Rechnungen (CM) in der Lage, eine gute approximative Beschreibung dieser Zustände zu liefern.

Wir wählen den Konfigurationsraum so aus, daß wir mit Hilfe von Variationsgleichungen einen Satz von Basiszuständen erzeugen, so daß deren Variationsenergien eine monoton wachsende Folge bilden. Auf diese Art wird die Wichtigkeit der Konfiguration durch die Dynamik des Vielteilchensystems, und nicht wie z.B. in MCSCF-Rechnungen durch eine a priori Auswahl, getroffen. Das Verfahren ist allgemein im Sinne, daß es sich ohne zusätzliche Modifikationen auf verschiedene Vielteilchenprobleme in der Kernphysik anwenden läßt. Andererseits ist es aber auch in der Lage, auf das spezielle Problem einzugehen, indem man Variationsgleichungen benutzt, die dem zu beschreibenden System am ehesten gerecht werden.

Von der Hartree-Fock-Methode weiß man, daß sie gerade in deformierten Kernen eine gute erste Näherung darstellt.²⁾

Wir haben deshalb in diesem Fall die Hartree-Fock-Gleichungen zur Erzeugung des Basissatzes benutzt. Dabei haben wir zunächst zwei verschiedene Sätze von Variationsgleichungen verglichen: die Hartree-Fock-Grundzustandsgleichungen und Hartree-Fock-Gleichungen mit einer zusätzlichen Orthogonalitätsbedingung, die auf zueinander orthogonale Basiszustände projiziert.

Veranlaßt einen weiteren Satz von Variationsgleichungen einzubringen, wird man durch die Tatsache, daß die Lösungen der Variationsgleichungen keine gute Drehimpulssymmetrie besitzen. Sie muß im Anschluß an die Variation mit Hilfe von Projektionsmethoden, die recht aufwendig werden können, restauriert werden. Verringern läßt sich dieser Aufwand zwar durch approximative Drehimpulstechniken, die aber nur auf besondere Fälle anwendbar sind (siehe Kap.III). Eine andere Möglichkeit bietet sich in der Benutzung einer zusätzlichen Zwangsbedingung in den Hartree-Fock-Gleichungen, den Constrained Hartree-Fock-Gleichungen (CHF), deren Lösungen eine Betonung der durch den Constrained erzwungenen Drehimpulskomponenten enthält. Dadurch kann einerseits erreicht werden, daß die niedrig-liegenden gewünschten Drehimpulseigenzustände des Spektrums durch einen kleineren Konfigurationsraum beschrieben werden können. Andererseits ist zu hoffen, daß die Zwangsbedingung sich so stark auswirkt, daß gewissermaßen eine approximative Drehimpulsprojektion vor der Variation vorgenommen wird,

so daß sich eine zusätzliche Projektion nach der Variation umgehen läßt.

Ist dies der Fall, so lassen sich CM-Rechnungen mit den CHF-Variationsgleichungen in großen Modellräumen praktizieren, die z.B. dazu dienen können, eine gute Approximation der Interbandlevel-Verteilung zu liefern und die sich gut zum Test von effektiven Wechselwirkungen in diesen sonst schwer zugänglichen Räumen eignen.

Die Konstruktion des Konfigurationsraumes erfolgt sequentiell aus den Lösungen der verschiedenen Sätzen von Variationsgleichungen, die eine monoton wachsende Folge in ihren Variationsenergien bilden.

Zur Erzeugung der Basis benutzen wir die Lösungen der Hartree-Fock-Gleichungen mit einer zusätzlichen Orthogonalitätsbedingung (II.1) und die Hartree-Fock-Grundzustandsgleichungen (II.2). In beiden Fällen müssen die Drehimpulszustände durch Projektion nach der Variation (PAV) gewonnen werden. Als drittes untersuchen wir noch die Hartree-Fock-Gleichungen mit einer zusätzlichen Zwangsbedingung, die eine approximative Drehimpulsprojektion vor der Variation bewirken soll (III.3).

II.1 Orthogonale Basis (Extended Hartree-Fock)

Das Extended Hartree-Fock-Verfahren (EHF) ist eine Methode zur sukzessiven Konstruktion orthogonaler Basiszustände. Zunächst werden die Grundzustandsgleichungen

$$\delta \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle = 0 \quad (1)$$

gleichzeitig mit der Normierungsbedingung

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1 \quad (2)$$

gelöst, so daß

$$E_0 = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle \quad (3)$$

das globale Minimum des Grundzustandes ist.

Hat man $|\psi_0\rangle$ gefunden, dann konstruiert man den nächsten Zustand via Variationsmethoden in der folgenden Weise:

Wiederum sucht man das globale Minimum der Variationsgleichungen

$$\delta \langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle = 0 \quad (4)$$

mit der Normierung

$$\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = 1 \quad (5)$$

erfüllt aber zusätzlich die in die Variationsgleichungen eingearbeitete Zwangsbedingung

$$\langle \psi_1 | \psi_0 \rangle = 0 \quad (6)$$

die zu $|\psi_0\rangle$ orthogonale Zustände erzeugt.

Sukzessive fortfahrend, sucht man nun Lösung um Lösung der Variationsgleichungen

$$\delta \langle \psi_n | \hat{H} | \psi_n \rangle = 0 \quad n > 1 \quad (7)$$

mit der Normierung

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 \quad (8)$$

die zu allen vorangegangenen Lösungen orthogonal sind

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0 \quad m = 0, 1, \dots, n-1 \quad (9)$$

deren Variationsenergien eine monoton wachsende Folge bilden

$$E_0 < E_1 < E_2 < \dots < E_n$$

bis N Zustände gefunden sind. Die Sätze nicht-linearer inhomogener Gleichungen können mit Hilfe des Newton-Raphson-Verfahrens gelöst werden.

Eine ausführliche Beschreibung des EHF-Verfahrens der nicht-linearen inhomogenen Variationsgleichungen und der Variationstechniken finden sich in Ref.9 .

Eine Basis in dieser Weise erzeugt, ist meist auch vollständig in Bezug auf den N-dimensionalen Raum, den sie aufspannt. Sie eignet sich besonders gut zur Konstruktion des Konfigurationsraumes, weil ihre Hamilton-Matrix, i.e.,

$$\langle \psi_i | \hat{H} | \psi_j \rangle := \begin{pmatrix} E_0 & \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_1 \rangle & \dots & \dots \\ & E_1 & & \\ & & E_2 & \\ & & & \ddots \\ & & & & E_N \end{pmatrix} \quad (10)$$

nach Konstruktion in ihren Diagonalelementen dominant ist und so beim Diagonalisieren von $\hat{H}$ eine rasche Konvergenz gegen die niedrig-liegenden Zustände des Spektrums gewährleistet.

Nachteil des Verfahrens ist, daß in der Variation jeder neu hinzukommende Zustand gefunden wird, indem man sein globales Minimum aufsucht. Da die Orthogonalitätsbedingung immer für alle bereits erzeugten Zustände gleichzeitig erfüllt sein muß, wird das Aufsuchen der Lösungen mit jedem Zustand schwieriger. In großen Konfigurationsräumen kann dieser Nachteil zu aufwendigen Computerarbeiten führen.

Daß man Variationsverfahren zur Konstruktion des Konfigurationsraumes heranzieht, ist das eigentlich Wichtige dieser CM-Rechnungen. Wie die Variationsgleichungen beschaffen sind, ist solange sie auf das spezielle Problem zugeschnitten sind, von untergeordneter Bedeutung.

So gesehen, lassen sich die Nachteile des EHF-Verfahrens einfach dadurch umgehen, daß man die Orthogonalitätsbedingungen einfach versuchsweise wegläßt. Das ist auch insofern nicht problematisch, da die notwendige Projektion auf Drehimpulszustände nach der Variation die Orthogonalität zerstören kann.

II.2. Nichtorthogonale Basis (Hartree-Fock-Gleichungen)

Die Zustände sind Lösungen der Hartree-Fock-Grundzustandsgleichungen (HF).

Das Verfahren besteht darin, daß man einfach die N niedrigsten Lösungen der Variationsgleichungen

$$\delta \langle \psi_n | \hat{H} | \psi_n \rangle = 0 \quad n = 0, 1, 2, \dots, N \quad (11)$$

mit der Normierung

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 \quad (12)$$

aufsucht und aussortiert, so daß ihre Variationsenergien

$$E_n = \langle \psi_n | \hat{H} | \psi_n \rangle \quad (13)$$

wieder eine monoton wachsende Folge bilden.

$$E_0 < E_1 < E_2 < \dots < E_N$$

Die Lösungen erhält man wieder mit dem Newton-Raphson-Verfahren. Der Vorteil dieser Methode ist offensichtlich: die Zustände zu erhalten ist wesentlich einfacher - nur ein Satz von Variationsgleichungen ist zu lösen.

Nachteil ist, daß lineare Abhängigkeiten erzeugt werden können, die sich erst bei der Diagonalisation der Norm-Matrix zeigen. Lineare Abhängigkeiten können aber auch im EHF-Verfahren durch die Projektion auf Drehimpulskomponenten produziert werden, so daß ein echter Nachteil gegenüber dem EHF-Verfahren gar nicht ersichtlich wird.

II.3. Drehimpulsgewichtete Basis.

In manchen Fällen ist es nützlich, Variationsmethoden auszuwählen, die die gewünschte physikalische Information näherungsweise aber unter geringeren Aufwand liefern.

Die Hartree-Fock-Gleichungen mit einem Drehimpuls constraint (CHF) produzieren Basiszustände mit den stark betonten gewünschten Drehimpulskomponenten. Projiziert man aus diesen Zuständen die Drehimpulskomponenten und erzeugt den Konfigurationsraum, so ist die Hoffnung, daß man mit wenigen Basiszuständen bereits eine gute Beschreibung des niedrig-liegenden Eigenwertspektrums erreicht.

Die CHF-Näherungen sind aber vielleicht auch in der Lage, so starke Vertreter in den gewünschten Drehimpulskomponenten zu erzeugen, daß näherungsweise z.B. Interbandlevel-Schemen berechnet werden können, indem man nur CM-Rechnungen ohne zusätzliche Drehimpulsprojektion durchführt.

Das Verfahren besteht darin, den Satz von Variationsgleichungen

$$\delta \langle \psi_n | \hat{H} | \psi_n \rangle = 0 \quad (14)$$

mit der Normierung

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 0 \quad (15)$$

und der zusätzlichen Zwangsbedingung

$$\langle \psi_n | \hat{J}^2 | \psi_n \rangle = J(J+1) \quad 10) \quad (16)$$

zu lösen, daß N Zustände gefunden werden, deren Variations-

energien eine monoton wachsende Folge bilden.

Die Zwangsbedingung (16) soll dabei bewirken, daß die gewünschte J-Komponente stärker vertreten ist. Da es sich aber bei (16) um eine Mittelwertbildung handelt, ist es durchaus möglich, daß nur die Nachbarkomponenten betont sind und die J-Komponente selbst nur schwach oder gar nicht vertreten ist.

Der Vorteil dieses Satzes von Variationsgleichungen ist in zweierlei Hinsicht zu erwarten.

Erstens wissen wir von der Zwangsbedingung (16), daß sie die J-Komponenten der Grundzustandsbande stark betont²³⁾ und es ist zu erwarten, daß sie das auch in den Anregungsbanden tut. Führt man jetzt zusätzlich die Drehimpulsprojektionen aus, so sollte man erwarten, daß mit wenigen Zuständen des Konfigurationsraumes die CM-Rechnungen bereits gut gegen die niedrig-liegenden Zustände des Energiespektrums konvergieren.

Zweitens lassen sich die CHF-Gleichungen als approximative Drehimpulsprojektion vor der Variation auffassen. Stark vertretene J-Komponenten in den Grundzustands- und Anregungsbanden erlauben es, CM-Rechnungen ohne zusätzliche Drehimpulsprojektionen auszuführen und so auf einfache Weise eine approximative Beschreibung der Interband-level-Verteilung zu erhalten.

Nachteilig ist, daß man bei der Anwendung solcher unprojizierten CM-Rechnungen darauf achten muß, Komponenten, die zwar einen vertretenen Eigenwert von $\hat{J}^2$ besitzen, deren J-Komponente selbst aber so gut wie gar nicht vertreten ist, auszusortieren.

III. Drehimpulsprojektionen.

In Variationsrechnungen stimmen die Symmetriegruppen des Variations-Hamilton-Operators meist nicht mit der Symmetriegruppe des Kern-Hamiltonoperators überein. Symmetrien müssen nach der Variation restauriert werden. Dies geschieht mit Hilfe von Projektionsmethoden, die aus den Lösungen Eigenzustände zu den Symmetrieoperatoren herausprojizieren (PAV = Projektion after Variation).

In unserem Variationsverfahren benutzen wir als Variationsgleichungen die gewöhnlichen Hartree-Fock-Gleichungen und modifizierte Hartree-Fock-Gleichungen, die alle als Lösungen Slater-Determinanten-Zustände $|\Psi\rangle$ besitzen. Ist $|\Psi\rangle$ ein Slater-Determinanten-Zustand, der aus einem Variationsverfahren gewonnen wurde, so besteht er im allgemeinen aus einer Überlagerung verschiedener Drehimpulskomponenten

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha JM} c_{JM}^{\alpha} |\alpha JM\rangle \quad (1)$$

$$\hat{J}^2 |\alpha JM\rangle = J(J+1) |\alpha JM\rangle \quad \hat{J}_z |\alpha JM\rangle = M |\alpha JM\rangle \quad (2)$$

α steht stellvertretend für die restlichen Quantenzahlen. Im weiteren Verlauf wird α der Übersichtlichkeit wegen unterdrückt.

Sind die Drehimpulseigenzustände in der Entwicklung von $|\Psi\rangle$ (1) bereits bekannt, so ist der Projektionsoperator durch die Definition

$$\hat{P}_{JM}^{\alpha} := |\alpha JM\rangle \langle \alpha JM| \quad (3)$$

bereits gefunden:

$$\hat{P}_K^J |\psi\rangle = |JK\rangle \langle JK|\psi\rangle = C_{JK} |JK\rangle \quad (4)$$

$$|\psi\rangle = \sum_{JK} \langle JK|\psi\rangle |JK\rangle \quad (5)$$

Im Allgemeinen sind die Komponenten aber nicht bekannt, deshalb ist der Projektionsoperator (4) hinsichtlich einer allgemeinen Anwendung nicht brauchbar.

Es müssen Projektionsmethoden entwickelt werden, die angewandt auf einen beliebigen ein-Slater-Determinanten Zustand die Drehimpulskomponenten und deren Entwicklungskoeffizienten herausprojizieren. Dabei sind die Drehimpulskomponenten Vielteilchen-Eigenzustände des Drehimpulsoperators.

Zunächst werden in Kap.III zwei der gebräuchlichsten Methoden kurz beschrieben. In III.1. der Shift-Operator vorgeschlagen von Löwdin ¹¹⁾, der aufgrund seiner Struktur ein endliches Summationsverfahren vorhersagt, vorausgesetzt der Zustand, auf den er wirkt, besitzt eine maximale Drehimpulskomponente $J_{\max}$

$$|\psi\rangle = \sum_{J=|K|}^{J_{\max}} \sum_K C_{JK} |JK\rangle \quad (6)$$

Ein anderer direkter Zugang zur Drehimpulsprojektion ist durch die Integration über die drei Eulerwinkel gegeben. Diese Methode findet Anwendung im Hill-Wheeler-Projektor ¹²⁾, den wir in III.2. kurz vorstellen. Beide Verfahren

besitzen Nachteile in ihren numerischen Anwendungen, der Hill-Wheeler-Projektor aufgrund des oszillierenden Charakters seines Integranden, der Shift-Operator, der ein ausgeprägter Vielteilchenoperator ist und so eine Vielzahl von Matrixelementberechnungen erforderlich macht. Diese lassen sich großen Teils umgehen, wenn sich die Integrationen im Hill-Wheeler-Verfahren ersetzen lassen durch eine endliche Summation. In Arbeiten von Kelemen und Dreizler ¹³⁾ wurde gezeigt, daß dies für axial-symmetrische Zustände mit $K=0$ (K ist die J_z -Quantenzahl) durchaus möglich ist. Cusson and Lee ¹⁴⁾ haben ein ähnliches Verfahren entwickelt, indem sie sogar in der Lage sind, die J, K -Komponenten von beliebigen Zuständen zu projizieren. Gleiches gilt für eine Weiterentwicklung der Kelemen und Dreizler Methode von P. Chattopadhyay ¹⁵⁾.

In Abschnitt 3 und 4 erläutern wir das Verfahren, das wir benutzt haben. Es schließt sich an ein Abschnitt über Bemerkungen zu einer eventuellen approximierten Drehimpulsprojektion, die in größeren Vielteilchenproblemen und zusätzlich erweitertem Modellraum notwendig werden.

III.1. Shift-Operator ¹¹⁾.

Zur Konstruktion des Shift-Operators nutzt man die Eigenschaften des Projektors (3) in umgekehrter Weise. Definiert wird ein Operator $\hat{O}_J$ bzw. $\hat{O}_K$ der die J- bzw. K-Komponente vernichtet

$$\hat{O}_J : = \{ \hat{J}^2 - J(J+1) \mathbb{1} \} |JK\rangle = 0 \quad (7a)$$

$$\hat{O}_K : = \{ \hat{J}_z - K \mathbb{1} \} |JK\rangle = 0 \quad (7b)$$

Die J- und die K-Komponente ergeben sich dann aus dem Zustand $|\psi\rangle$ durch Mehrfachanwendung der Operatoren $\hat{O}_J$ bzw. $\hat{O}_K$

$$\hat{P}_J(\hat{J}^2) \cdot \hat{P}_K(\hat{J}_z) |\psi\rangle = c_{JK} |JK\rangle \quad (8a)$$

mit

$$\hat{P}_J(\hat{J}^2) : = \prod_{L \neq J} \frac{\hat{J}^2 - L(L+1) \mathbb{1}}{J(J+1) - L(L+1)} \quad (8b)$$

und

$$\hat{P}_K(\hat{J}_z) : = \prod_{h \neq K} \frac{\hat{J}_z - h \mathbb{1}}{K - h} \quad (8c)$$

wobei $\hat{P}_J(\hat{J}^2)$ so konstruiert ist, daß er alle L-Komponenten mit Ausnahme von $L \neq J$ vernichtet und den Eigenwert zu $L=J$ gleichzeitig normiert. Gleiches gilt für

$\hat{P}_K(\hat{J}_z)$, der alle M-Komponenten mit Ausnahme von $M=K$ vernichtet und den Eigenwert zu $M=K$ auf eins normiert. Aus diesen Eigenschaften folgt direkt, daß $\hat{P}_J(\hat{J}^2)$ und $\hat{P}_K(\hat{J}_z)$ Projektionsoperatoren sind, die zusammengesetzt gearde den Projektionsoperator

$$\hat{P}_K^J := \hat{P}_J(\hat{J}^2) \circ \hat{P}_K(\hat{J}_z) \quad (9)$$

bilden.

$$\hat{P}_K^J |\psi\rangle = C_{JK} |JK\rangle \quad (10)$$

$\hat{J}^2$ und $\hat{J}_z$ in dem Projektor $\hat{P}_K^J$ lassen sich mit Hilfe von Auf- und Absteigeoperatoren $\hat{J}_+$ bzw. $\hat{J}_-$ (16) in einem geschlossenen Ausdruck zusammenfassen (siehe Ref.11)

$$\hat{P}_K^J = (2J+1) \frac{(J+K)!}{(J-K)!} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\hat{J}_+^{J-K+n} \hat{J}_-^{J-K+n}}{n! (2J+n+1)!} \quad (11)$$

Dieser Ausdruck zeigt deutlich, daß $\hat{P}_J^K$ angewandt auf einen Zustand $|\psi\rangle$, der eine maximale Drehimpulskomponente $J_{\max}$ besitzt, dessen Entwicklung nach Eigenzuständen von $\hat{J}^2$ und $\hat{J}_z$ also endlich ist, eine endliche Darstellung besitzt. Nachteil des Verfahrens ist es, daß in jedem Schritt der Summation über n die Matrixelemente von $\hat{J}_+^v$ und $\hat{J}_-^n$ ($v_{1n} = 0, 1, \dots, J-K+n$) berechnet werden müssen (was zu einem erheblichen Aufwand in den Rechenprogrammen führen kann, besonders im Falle von Zuständen mit hohen J-Komponenten).

III.2. Hill-Wheeler-Projektor ¹²⁾.

Das bekannteste und wohl auch am meisten praktizierte Verfahren zur Projektion auf Eigenzustände von $\hat{J}^2$ und $\hat{J}_z$ ist von Hill-Wheeler vorgeschlagen worden. Der Projektor hat hierin die Gestalt

$$\hat{P}_N^J = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega \mathcal{D}_{NN}^J(\Omega)^* \hat{R}(\Omega) \quad (12)$$

Bei dieser Methode wird Gebrauch gemacht von einer Mittelung über die drei Euler-Winkel.

$$\Omega := \{\alpha, \beta, \gamma\}$$

$\hat{R}(\Omega)$ ist der Rotationsoperator

$$\hat{R}(\Omega) = \exp\{-i\alpha\hat{J}_z\} \cdot \exp\{-i\beta\hat{J}_y\} \cdot \exp\{-i\gamma\hat{J}_z\} \quad (13)$$

der Drehungen um die $\hat{J}_z$ - bzw. $\hat{J}_y$ -Achse des intrinsischen Systems beschreibt. Die $D_{MM'}^J(\Omega)$ sind die Wigner'schen Drehmatrizen, die definiert sind durch die Matrixelemente von $\hat{R}(\Omega)$ ¹⁶⁾

$$\langle \xi JM | \hat{R}(\Omega) | \xi' J' M' \rangle = \delta_{\xi\xi'} \delta_{JJ'} \mathcal{D}_{MM'}^J(\Omega) \quad (14)$$

(ξ steht für einen Satz zusätzlicher Quantenzahlen)

mit

$$\mathcal{D}_{MM'}^J(\Omega) := e^{-i\alpha M} \langle JM | e^{-i\beta\hat{J}_y} | JM' \rangle e^{-i\gamma M'} \quad (15)$$

Der Vorteil dieser Projektionsmethode liegt in ihrer direkt möglichen Anwendung begründet. Die Drehmatrizen $D_{KK}^J(\Omega)$ sind bekannte Funktionen und die Drehungen in $\hat{R}(\Omega)$ lassen sich "straight forward" auf Zustände $|\psi\rangle$ anwenden. Der Nachteil des Verfahrens liegt im oszillierenden Charakter des Integranden. Integrationen über den Ω -Bereich können sehr aufwendig werden, weil die Stützstellen bei der numerischen Integration - um Fehler auszuschliessen - dicht gewählt werden müssen. Trotzdem kann man nie sicher sein, daß wirklich alle Beiträge des Integranden berücksichtigt werden, besonders in Hochspinzuständen, wo viele kleine Beiträge aufaddiert werden müssen.

III.3. Drehimpulsprojektion, Darstellung in einer endlichen Summe.

Löwdin's Shift- und Hill-Wheeler's Operator liefern identische Ergebnisse, für den Fall, daß sie auf einen Zustand $|\Psi(\kappa)\rangle$ angewendet werden, der Eigenzustand zu $\hat{J}_z$ ¹⁸⁾ ist. Diese Übereinstimmung und die Gewißheit, daß sich eine endliche Darstellung des Shift-Operators angewandt auf einen Zustand $|\Psi(\kappa)\rangle$ mit maximalem Drehimpuls $J_{\max}$ ergeben muß, haben einige Autoren ¹⁷⁾ veranlaßt nach einer Darstellung des Hill-Wheeler-Projektors zu suchen, die die Integration über die Euler-Winkel durch eine endliche Summation über diskrete Winkelwerte gestattet. Eine mögliche Darstellung ¹⁵⁾ entwickelt den Hill-Wheeler-Projektor in eine endliche Summe in allen drei Euler-Winkeln, dabei wird auf Pseudoquantenzahlen von J_z projiziert. Die K-Projektion erreicht man durch anschließende Diagonalisierung der Normmatrix und der Energiematrix in J . Dieses Verfahren hat den Nachteil, daß man mit komplexen Größen arbeiten muß, so daß sich der Speicherplatzbedarf verdoppelt. Außerdem erhöht man die Anzahl der Stützstellen auf die Anzahl der β -Punkte zur dritten Potenz. Für kleine Vielteilchensysteme erscheint uns dieser Aufwand zu groß.

Wir sind mit unserer Methode dem Vorschlag von Kelemen und Dreizler ¹³⁾ gefolgt, weil in diesem Verfahren die Parameter J und K nur in einen Gewichtungsfaktor eingehen, der numerisch leicht zu berechnen ist, während alle

anderen aufwendigen Operationen für alle J- und K-Werte unabhängig von J und K sind. Dies bedeutet: hat man eine Komponente $C_{JK}|JK\rangle$ herausprojiziert, liefert das Verfahren ohne zusätzlichen Aufwand alle übrigen Komponenten. Dies ist z.B. nicht der Fall in Ref.14. Dort hat man weniger Stützstellen auszurechnen, aber die Vorfaktoren hängen von J ab, so daß man für jedes J die Rechnungen wiederholen muß. Da wir daran interessiert waren, möglichst alle J-Beiträge zu erhalten, haben wir uns für die Kelemen-Dreizler-Methode entschieden.

Ist $|\psi\rangle$ ein Zustand, der sich in einer endlichen Summe über J entwickeln läßt

$$|\psi\rangle = \sum_{J=|K|}^{J_{\max}} C_{JK} |JK\rangle \quad (16)$$

und der Eigenzustand zu $\hat{J}_z$ ist

$$\hat{J}_z |\psi\rangle = K |\psi\rangle \quad (17)$$

dann läßt sich $|\psi\rangle$ genau wie in Ref.13 nach Eigenfunktionen von $\hat{J}_y$ entwickeln

$$|\psi\rangle = \sum_{m=-J_{\max}}^{J_{\max}} |\tilde{m}\rangle \quad (18)$$

mit

$$|\tilde{m}\rangle = \sum_{J=|K|}^{J_{\max}} C_{JK} C(Jm|JK) |Jm\rangle \quad (19)$$

wobei

$$\hat{J}_y |jm\rangle = m |jm\rangle \quad (20)$$

Die Projektion auf den Zustand $|Jk\rangle$ erreicht man durch die direkte Anwendung von

$$\hat{P}_k^J = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega \mathcal{D}_{k0}^{J*}(\Omega) \hat{R}(\Omega)$$

auf $|\psi\rangle$. Die Matrixelemente eines Operators $\hat{O}$ sind dann gegeben durch: $([\hat{O}, \hat{P}_k^J] = 0)$

$$\langle \psi | \hat{O} \hat{P}_k^J | \psi \rangle = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega \mathcal{D}_{k0}^{J*}(\Omega) \langle \psi | \hat{O} \hat{R}(\Omega) | \psi \rangle \quad (21)$$

Nach Zerlegung von $\hat{R}(\Omega)$ in die Anteile der einzelnen Drehungen

$$\langle \psi | \hat{O} \hat{R}(\Omega) | \psi \rangle = \langle \psi | e^{-i\alpha \hat{J}_z} e^{-i\beta \hat{J}_y} e^{-i\gamma \hat{J}_z} | \psi \rangle \quad (22)$$

lassen sich, wenn $\hat{O}$ mit $\hat{J}_z$ vertauscht, die Drehungen um $\hat{J}_z$ ausführen

$$\langle \psi | \hat{O} \hat{R}(\Omega) | \psi \rangle = e^{-i\alpha k} \langle \psi | \hat{O} e^{-i\beta \hat{J}_y} | \psi \rangle e^{-i\gamma k} \quad (23)$$

und die Integration über die Winkel α und γ ausführen. Es bleibt die Drehung um β

$$\hat{R}(\beta) := e^{-i\beta \hat{J}_y} \quad (24)$$

und somit

$$\langle \psi | \hat{O} \hat{P}_k^J | \psi \rangle = (2J+1)/2 \int_0^\pi d\beta \sin\beta d_{k0}^{J*}(\beta) \langle \psi | \hat{O} \hat{R}(\beta) | \psi \rangle \quad (25)$$

Drückt man jetzt - wie im Fall $K=0$ (Kelemen und Dreizler)

$\hat{R}(\beta)$ mit Hilfe des Projektors $\hat{Q}_m$ aus

$$\hat{R}(\beta) = \sum_{m=-j_{\max}}^{j_{\max}} e^{-i\beta m} \hat{Q}_m \quad (26)$$

so liefert $\hat{R}(\beta)$ in $\langle \psi | \hat{O} \hat{R}(\beta) | \psi \rangle$ als Beitrag zur Integration über β nur einen skalaren Faktor $e^{-im\beta}$

$$\langle \psi | \hat{O} \hat{P}_K^j | \psi \rangle = (j + \frac{1}{2}) \sum_{m=-j_{\max}}^{j_{\max}} \langle \psi | \hat{O} \hat{Q}_m | \psi \rangle \int d\beta \sin\beta d_{KK}^{j(\beta)} e^{-im\beta} \quad (27)$$

$\hat{Q}_m$ hängt nicht von β ab

$$\hat{Q}_m = \frac{1}{2j_{\max}+1} \sum_{n=0}^{2j_{\max}} \exp\left\{\frac{2\pi i}{2j_{\max}+1} n \cdot m\right\} \cdot \underbrace{\exp\left\{\frac{2\pi i}{2j_{\max}+1} n \cdot \hat{J}_y\right\}}_{:= \hat{R}(n, \hat{J}_y)} \quad (28)$$

Die kontinuierliche Drehung durch den Operator $\hat{R}(\beta)$ um die J_y -Achse ist zurückgeführt auf die Berechnung von $\hat{R}(n, \hat{J}_y)$ auf eine endlichen Zahl von Stützstellen.

$$\langle \psi | \hat{O} \hat{Q}_m | \psi \rangle = \frac{1}{2j_{\max}+1} \sum_{n=0}^{2j_{\max}} \exp\left\{\frac{2\pi i}{2j_{\max}+1} n \cdot m\right\} \langle \psi | \hat{O} \hat{R}(n, \beta) | \psi \rangle \quad (29)$$

Die Integration über β

$$I(m, j, K) = \int_0^\pi d\beta \sin\beta d_{KK}^{j(\beta)} e^{-im\beta} \quad (30)$$

wird z.B. in Ref. 15 durchgeführt, das Ergebnis ist:

$$I(m, j, \kappa) = \sum_e |d_{-e\kappa}^{(j)}(\frac{\pi}{2})|^2 \begin{cases} \frac{\pi}{2i} (\delta_{e, m-1} - \delta_{e, m+1}) & l-m = \text{ungerade} \\ -\frac{2}{(e-m)^2-1} & l-m = \text{gerade} \end{cases} \quad (31)$$

oder in Real- und Imaginärteil ausgedrückt

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} I(m, j, \kappa) &= \frac{\pi}{2i} \left\{ |d_{-m+1\kappa}^{(j)}(\frac{\pi}{2})|^2 - |d_{-m-1\kappa}^{(j)}(\frac{\pi}{2})|^2 \right\} \quad l-m = \text{ungerade} \\ \operatorname{Re} I(m, j, \kappa) &= - \sum_e |d_{-e\kappa}^{(j)}(\frac{\pi}{2})|^2 \frac{2}{(e-m)^2-1} \quad l-m = \text{gerade} \end{aligned} \quad (32)$$

Ist $\hat{O}$ ein hermitescher Operator

$$\hat{O}^+ = \hat{O} \quad (33a)$$

und vertauscht $\hat{O}$ mit $\hat{J}_z$

$$[\hat{O}, \hat{J}_z] = 0 \quad (33b)$$

dann gilt für einen axialsymmetrischen Zustand

$$\hat{J}_z |\psi\rangle = \kappa |\psi\rangle \quad (33c)$$

$$\langle \psi | \hat{O} \hat{R}(n, \beta) | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O} \hat{R}(n, \beta) | \psi \rangle^* \quad (33d) \quad (13, 15)$$

Damit folgt für die Matrixelemente von $\hat{O} \hat{P}_K^J$ ($\xi := \frac{2\pi \cdot n}{2j_{\max}+1}$)

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{O} \hat{P}_K^J | \psi \rangle &= \\ \sum_{n=0}^{2j_{\max}} \langle \psi | \hat{O} e^{-i\xi \hat{J}_y} | \psi \rangle &= \\ \left\{ \sum_{m=-j_{\max}}^{j_{\max}} \frac{\pi}{2} \left[|d_{-m+1\kappa}^{(j)}(\frac{\pi}{2})|^2 - |d_{-m-1\kappa}^{(j)}(\frac{\pi}{2})|^2 \right] \sin(\xi \cdot m) \right. \\ &\quad \left. - 2 \sum_{m=-j_{\max}}^{j_{\max}} \left[\sum_e |d_{-e\kappa}^{(j)}(\frac{\pi}{2})|^2 \frac{1}{(e-m)^2-1} (l-m = \text{gerade}) \right] \cos(\xi \cdot m) \right\} \end{aligned} \quad (34)$$

Das ist der Ausdruck, der zu programmieren ist.

In besonderen Fällen - Symmetrieeigenschaften der Zustände $|\Psi\rangle$ (wie z.B. Zustände guter Parität) - ergeben sich Reduktionen in der Anzahl der Stützstellen. Da die Anzahl der β -Punkte von $J_{\max}$ abhängen, bekommen solche Vereinfachungen des numerischen Problems erhebliches Gewicht in Hochspinzuständen. In Ref.13 und Ref.15 z.B. ist Näheres darüber nachzulesen. Rechnungsvereinfachende Überlegungen zum Ausdruck (34) werden im Anhang II dieser Arbeit angestellt.

III.4. K-Projektion.

Die im vorangegangenen Abschnitt behandelte Methode zur Drehimpulsprojektion ist nur anwendbar, wenn der Projektor auf einen Zustand wirkt, der bereits axialsymmetrisch ist oder dessen K-Komponenten vorher aus $|\psi\rangle$ heraus projiziert wurden. Da wir es im allgemeinen mit Lösungen zu tun haben, die keine Axialsymmetrie besitzen, müssen wir beschreiben, wie wir die Zustände vorbehandeln, um unsere Methode benutzen zu können.

Zur Lösung der Variationsgleichungen entwickeln wir die Hartree-Fock-Orbitale $|\lambda\rangle$ in einem beschränkten Raum von Modellfunktionen, die in unserem Fall aus Schalenmodellwellenfunktionen bestehen

$$|\lambda\rangle = |n\ell j m \tau\rangle \quad (35)$$

j bezeichnet die Komponente des Gesamtdrehimpulses $\hat{j}$, m dessen j_z -Komponente, ℓ die Drehimpulskomponente, n die Hauptquantenzahl und τ die Isospinkomponente. Für die K-Projektion brauchen wir nur die m -Quantenzahl, deshalb schreiben wir abkürzend

$$|\lambda\rangle = |f m\rangle \quad (36)$$

Die Entwicklung der Teilchenwellenfunktion $|\lambda\rangle$ ist gegeben durch

$$|\lambda\rangle = \sum_{f m}^{M_s} c_{f m} |f m\rangle \quad (37)$$

M_s symbolisiert die Summation über die ausgewählten Schalen des Modellraumes.

Der Slater-Determinanten-Zustand $|\Psi\rangle$ ist gegeben durch das direkte Produkt der Hartree-Fock-Orbitale

$$|\Psi\rangle = |\lambda_1\rangle \otimes |\lambda_2\rangle \otimes |\lambda_3\rangle \dots \otimes |\lambda_A\rangle$$

Somit ergibt sich für die Entwicklung von $|\Psi\rangle$ in der Modellbasis

$$|\Psi\rangle = \sum_{\substack{j_1 m_1 \\ j_2 m_2 \\ \vdots \\ j_A m_A}} C_{j_1 m_1}^{\lambda_1} C_{j_2 m_2}^{\lambda_2} \dots C_{j_A m_A}^{\lambda_A} |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \dots \otimes |j_A m_A\rangle \quad (38)$$

J_z ist eine additive Quantenzahl, d.h. der Operator $\hat{J}_z$ angewandt auf $|\Psi\rangle$ ist darstellbar als Summe der $\hat{j}_z$ angewandt auf die Schalenmodellbasis und die Komponente von gesamt $\hat{J}_z, M$, ergibt sich einfach durch Summation der j_z -Quantenzahlen $m_1 \dots m_A$

$$M = m_1 + m_2 + m_3 + \dots + m_A \quad (39)$$

Dieser Sachverhalt erlaubt es, aus der Entwicklung (38) einen beliebigen M Wert ($|M| \leq J$) einfach dadurch herauszuprojezieren, daß man in der Summation (38) nur die Beiträge berücksichtigt, deren Summe über m_v ($v=1 \dots A$) gerade M ergeben. Die M -Komponente von $|\Psi\rangle$, $|\Psi(M)\rangle$, ergibt sich also in der Einschränkung

$$|\Psi(M)\rangle = \sum_{\substack{j_1 m_1 \\ j_2 m_2 \\ \vdots \\ j_A m_A}} C_{j_1 m_1}^{\lambda_1} C_{j_2 m_2}^{\lambda_2} \dots C_{j_A m_A}^{\lambda_A} |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \dots \otimes |j_A m_A\rangle \quad (40)$$

$$[m_1 + m_2 + \dots + m_A = M]$$

Die Projektion auf einen axialsymmetrischen Zustand erfolgt durch Aussortieren von Kombinationen in (38) nach der Art (39). Daher werden nur die in (40) erlaubten Kombinationen in einer Datei-Tabelle zusammengefaßt. Gleichzeitig erfolgt eine Reduktion im Sinne des Pauli-Prinzips, das gleiche Besetzung in den Summanden von (40) **ausschließt**. Kombinationen, die sich bis auf die Entwicklungskoeffizienten nur durch Vertauschungen ergeben, werden zusammengefaßt. Diese Techniken reduzieren den Aufwand, den man mit diesen Basissätzen in der Drehimpulsprojektion betreiben muß, drastisch.

Da man aber durch die K-Projektion eine Auswahl der Kombinationen in der Entwicklung der Teilchenorbitale vorgenommen hat, ist man gezwungen, alle Operationen, die die Drehimpulsprojektion erfordern, wie z.B. die Konstruktion der Überlappdeterminanten mit den verschiedenen Drehungen, in der Schalenmodelbasis durchzuführen. Dies bedeutet, daß sich nicht mehr mit einer Determinante, wie in der Entwicklung (38), der vollständigen Summation über den Modellraum arbeiten läßt, sondern nur noch mit einer großen Anzahl von Determinanten ausgewählter Kombinationen des Modellraumes selbst, was das Verfahren besonders in größeren Vielteilchenproblemen und erweitertem Modellraum erschweren dürfte.

III.5. Drehimpulsprojektionen in Hinblick auf approximative Methoden.

Für die Beschreibung von atomaren und nuklearen Strukturen sind die Konstruktionen von Wellenfunktionen mit gutem Drehimpuls unzweifelhaft von großer Bedeutung.

Nun sind die Lösungen, die man aus Variationsgleichungen gewinnt, im allgemeinen nicht Eigenfunktionen zum Drehimpulsoperator $\hat{J}^2$ und enthalten deshalb konsequenterweise verschiedene Drehimpulskomponenten.

$$|\psi\rangle = \sum_{j_k} c_{j_k} |j_k\rangle \quad (41)$$

Die Komponenten lassen sich mit Hilfe von Projektionsmethoden (III.1.-III.3.) herausprojizieren und die Projektion identifiziert man dann mit dem physikalischen Zustand des Atoms oder des Kerns.

Die Standardmethoden sind die von Hill-Wheeler ¹²⁾ vorgeschlagene Integration über die drei Euler-Winkel oder die Summationen mit Löwdin's-Shift-Operator ¹¹⁾. Beide Verfahren führen in größeren A-Teilchensystemen zu aufwendigen Computerrechnungen oder beinhalten bereits numerische Unsicherheiten, die in ihrer Struktur begründet liegen, so die Integraldarstellung des Hill-Wheeler-Projektors ¹²⁾ durch den oszillierenden Charakter ihres Integranden und der Shift-Operator ¹¹⁾ durch die große Anzahl der Matrixelemente, die in die Berechnung eingehen.

Ein praktikabler Vorschlag ist deshalb, die Integration über die drei Euler-Winkel im Hill-Wheeler-Projektor,

durch eine Summation über ein Polynom n-ten Grades in den Winkeln zu ersetzen (Kelemen und Dreizler ¹³⁾, Cusson und Lee ¹⁴⁾).

Findet sich ein solches Polynom, so ist die Darstellung exakt. Der Grad des Polynoms hängt dabei entweder von $J_{\max}$, dem maximal möglichen Gesamtdrehimpuls, der in der Wellenfunktion enthalten ist, oder von J selbst ab (Cusson und Lee ¹⁴⁾), so daß eine Summation umfangreicher sein kann als eine numerische Integration. Besonders nachteilig wirkt sich die $J_{\max}$ bzw. J -Abhängigkeit der Polynome mit zunehmender Teilchenzahl, Erweitern des Funktionenraumes der Schalenwellenfunktionen bzw. beim Übergang zu höheren J -Zuständen, aus.

Es ist deshalb erforderlich, approximative Methoden zur Drehimpulsprojektion einzuführen, die den numerischen Aufwand drastisch verringern. Eine Reihe von Autoren ¹⁹⁾ haben sich dieses Problems angenommen. Sie gehen alle von den folgenden Überlegungen aus: Die Operatoren, die dabei untersucht werden, sind $\hat{O} = \mathbb{1}$ bzw. $\hat{H}$, für die

$$[\hat{O}, \hat{J}_z] = 0$$

und wenn $|\psi\rangle$ ein axialsymmetrischer Zustand mit $K=0$ ist, sind die Erwartungswerte gegeben durch

$$\begin{aligned} O_{J^{\kappa=0}}^{\kappa=0} &= \langle \psi | \hat{O} \hat{P}_J^{\kappa=0} | \psi \rangle \\ &= (J+1/2) \int_{-1}^1 d(\cos\beta) d_{00}^{(J)}(\beta) \langle \psi | \hat{O} e^{-i\beta \hat{J}_y} | \psi \rangle \quad (42) \end{aligned}$$

Alle Näherungen stützen sich auf zwei verschiedene Tech-

niken, entweder die Gauss-Approximation, oder eine etwas komfortablere entwickelt von Kamlah ²⁰⁾. Sie machen Gebrauch von einem scharfen Abfall der Funktionen $n(\beta)$ und $h(\beta)$, wenn β sich von Null entfernt. Mit

$$n(\beta) := \langle \psi | e^{-i\beta \hat{J}_y} | \psi \rangle \quad (43a)$$

$$h(\beta) := \langle \psi | \hat{H} e^{-i\beta \hat{J}_y} | \psi \rangle \quad (43b)$$

wobei $\hat{J}_y$ die J_y -Komponente des Drehimpulsoperators $\hat{J}$ ist.

In der Gauss-Approximation wird davon ausgegangen, daß $n(\beta)$ ersetzt werden kann durch

$$n_G(\beta) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \beta^2 \langle \hat{J}_y^2 \rangle \right\} \quad (45)$$

und $h(\beta)$ näherungsweise durch

$$h_G(\beta) = [\langle \hat{H} \rangle - B \beta^2] \exp \left\{ -\frac{1}{2} \beta^2 \langle \hat{J}_y^2 \rangle \right\} \quad (46)$$

wobei B definiert ist durch

$$B = \frac{1}{2} [\langle \hat{H} \hat{J}_y^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle \langle \hat{J}_y^2 \rangle] \quad (47)$$

Die Kamlah-Näherung ²⁰⁾ benutzt die funktionale Form von $n(\beta)$ und $h(\beta)$ und ersetzt $h(\beta)$ durch

$$h_K(\beta) = \alpha_0 n(\beta) - \alpha_2 \frac{d^2}{d\beta^2} n(\beta) \quad (48)$$

mit den Randbedingungen

$$h(0) = h_K(0) \quad (49a)$$

und

$$\frac{d^2 h(0)}{d\beta^2} = \frac{d^2 h_K(0)}{d\beta^2} \quad (49b)$$

die die Koeffizienten α_0 und α_2 bestimmen. So trägt z.B. α_2 die Information von $\hat{H}$ in der folgenden Form

$$\alpha_2 = \frac{\langle \hat{H} \hat{j}_y^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle \langle \hat{j}_y^2 \rangle}{\langle \hat{j}_y^4 \rangle - \langle \hat{j}_y^2 \rangle^2} \quad (50)$$

Wie aus der Größe B in der Gauss-Approximation und α_2 in der Kamlah-Methode zu ersehen ist, ist die Annahme, die in beide eingehen, daß

$$\langle \hat{H} e^{-i\beta \hat{j}_y} \rangle \quad \text{und} \quad \langle \hat{H} \rangle \langle e^{-i\beta \hat{j}_y} \rangle$$

als Funktionen des Rotationswinkels β nahezu dasselbe Verhalten zeigen, so daß durch die Differenz ihrer approximierten Versionen A_1

$$A_1 := \langle \hat{H} \hat{j}_y^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle \langle \hat{j}_y^2 \rangle \quad (51)$$

das β -Verhalten von $h(\beta)$ über den gesamten β -Bereich gut genähert wird.

IV. Untersuchungen und Ergebnisse

Wir haben in dieser Arbeit CM-Rechnungen durchgeführt, die in der Lage sind, systematisch die Eigenzustände des niedrig-liegenden Eigenwertsspektrums von Kernen zu beschreiben.

Dabei geschieht der Aufbau des Konfigurationsraumes mit Zuständen, die wir aus den Lösungen von Variationsgleichungen erhalten. So zu verfahren bringt die Vorteile, daß

- a) die CM-Rechnungen auf große Vielteilchensysteme ausgedehnt werden können,
- b) sich der Modellraum, in dem die Variationsgleichungen gelöst werden, einfach erweitern läßt,
- c) die Dynamik des Vielteilchensystems selbst die Auswahl der Konfigurationen trifft und keine a priori Auswahl der "wichtigsten" Konfigurationen getroffen werden muß ²¹⁾,
- d) für spezielle Probleme geeignete Variationsgleichungen im Verfahren benutzt werden können.

In unseren Untersuchungen sind wir von den Hartree-Fock-Gleichungen mit einer zusätzlichen Orthogonalitätsbedingung (EHF) ausgegangen, wie sie in CM-Rechnungen in ^{20}Ne bereits behandelt wurden ⁹⁾ (IV.2.1.). Wir haben im Hinblick auf eine Erweiterung des Verfahrens auf größere

Vielteilchensysteme - es vereinfacht das Problem und erspart so umfangreiche Rechenarbeit - die Hartree-Fock-Grundzustandsgleichungen (HF) in Abschnitt IV.2.2. und Hartree-Fock-Gleichungen mit einer Drehimpulsbedingung (CHF) in Abschnitt IV.2.3. in die Untersuchung mit einbezogen. Dabei haben wir den Vorschlag von Miller und Dreizler ⁹⁾ übernommen, und genau wie im Falle der EHF-Variationsgleichungen die Rechnungen in ^{20}Ne durchgeführt. In ^{20}Ne -Kern, wie wir es behandeln, sehen wir als ein Modell an, in dem sich die Untersuchungen einfach durchführen lassen.

Eine Erweiterung des Vielteilchenproblems auf ^{28}Si nehmen wir in Abschnitt IV.3. vor, wo wir die Ergebnisse von CM-Rechnungen in ^{28}Si mit Zuständen aus den Lösungen von HF-Gleichungen vorstellen.

IV.1. Die numerischen Verfahren

Die Variationsgleichungen werden mit der Newton-Raphson-Methode gelöst (siehe z.B. Ref.9). Durch Variation werden die Entwicklungskoeffizienten der HF-Orbitale und die Lagrange-Multiplikatoren bestimmt. Im Falle der EHF-Gleichungen sucht man erst die Lösung des Grundzustandes auf und dann sukzessiv die Zustände mit höheren Variationsenergien, so daß diese zu allen bereits gefundenen Lösungen orthogonal sind. Dieses Verfahren wird in großen Konfigurationsräumen beschwerlich, denn jede Lösung der verschiedenen Variationsgleichungen korrespondiert

mit der Suche nach dem globalen Minimum der Variationsenergie.

Geht man davon aus, daß das Wichtige bei der Konstruktion des Konfigurationsraumes ist, die niedrigsten Lösungen der Variationsgleichungen als Basiszustände zu benutzen, und ist es nur von untergeordneter Bedeutung, ob diese einen orthogonalen Satz bilden oder nicht, so läßt sich der Aufwand drastisch verringern, wenn man die Orthogonalitätsbedingungen wegläßt und nur die HF-Grundzustandsgleichungen zur Konstruktion des Konfigurationsraumes heranzieht.

Die Lösungen beider Variationsgleichungen besitzen keine gute Drehimpulssymmetrie. Projektionen auf Drehimpulseigenzustände müssen im Anschluß an die Variation durchgeführt werden. Dazu benutzen wir das Verfahren, wie wir es in Kap.III.3. vorgestellt haben. Zustände, die nicht-axial-symmetrisch sind, müssen zunächst auf Eigenzustände von $\hat{J}_z$ projiziert werden. Die Programme für die Projektion auf Drehimpulseigenzustände liefern zwar - ohne zusätzlichen Aufwand - mit einem Drehimpuls gleichzeitig alle, der Rechenaufwand kann sich aber auch trotz dieser Technik - vorausgesetzt man ist immer an mehreren Drehimpulskomponenten gleichzeitig interessiert - zu einem erheblichen Umfang auswachsen.

Die Projektion auf Drehimpulseigenzustände ist immer für den gesamten Konfigurationsraum durchzuführen, d.h. es sind stets die Matrixelemente

$$P_j^{mn} = \langle \psi_m | \hat{P}_j | \psi_n \rangle \quad (1)$$

und

$$n, m = 1, 2, \dots, N$$

$$n \geq m$$

$$E_j^{mn} = \langle \psi_m | \hat{H} \hat{P}_j | \psi_n \rangle \quad (2)$$

zu berechnen.

Dieses Problem läßt sich verringern, wenn man etwa Gleichungen der Art - wie sie die CHF-Gleichungen darstellen - als Variationsgleichungen benutzt, die eine gewünschte J-Komponente in den Lösungen favorisieren, so daß nach PAV bereits stärkere Vertreter der J-Komponente im Konfigurationsraum zur Verfügung stehen und man auf die Weise mit weniger Zuständen zur Beschreibung des niedrig-liegenden Energiespektrums in der J-Bande auskommt. Dieser Vorteil bekäme z.B. erhebliches Gewicht bei der Berechnung von Hochspinzuständen in einer Region, wo "backbanding" stattfindet.

Darüber hinaus ließe sich untersuchen, ob sich mit einer Zwangsbedingung - wie sie in CHF-Gleichungen auftritt - etwa approximative Drehimpulsprojektion gleichzeitig mit der Variation durchführen läßt, so daß sich eine volle Drehimpulsprojektion nach der Variation umgehen läßt. CM-Rechnungen mit diesen Zuständen ausgeführt, sollten bereits in der Lage sein, eine approximative Beschreibung des Spektrums zu liefern, - vorausgesetzt, die Zustände besitzen wirklich starke Vertreter der gewünschten J-Komponente. Diese Rechnungen würden sich besonders zum Testen von effektiven Wechselwirkungen anhand der erzeugten Intra-band - Niveau - Aufspaltungen eignen.

Zu diesem Zweck benutzen wir die CHF-Gleichungen als Variationsgleichungen, um mit deren Lösungen den Basis-satz des Konfigurationsraumes zu erzeugen. Im Abschnitt IV.2.3. werden die Ergebnisse dieser Rechnungen unter den zwei verschiedenen Gesichtspunkten untersucht.

Die Untersuchungen mit diesen drei verschiedenen Sätzen von Variationsgleichungen führen wir in ^{20}Ne durch, das - wie wir es behandeln - bereits genügend Aussagekraft besitzt und sich rechentechnisch leicht behandeln läßt.

Eine Erweiterung auf ^{28}Si mit zwölf aktiven Teilchen in der s-d-Schale, nehmen wir in Abschnitt IV.3. vor, wo wir die Ergebnisse von CM-Rechnungen in ^{28}Si mit Zuständen aus den Lösungen von HF-Gleichungen vorstellen. ^{28}Si stellt aufgrund seiner komplizierten Levelstruktur einen besseren Test für das Verfahren dar.

In allen Rechnungen nehmen wir an, daß das Innere des Kerns aus einem ^{16}O -core besteht, der nicht an der Variation teilnimmt. In ^{20}Ne werden die äußeren vier Valenznukleonen ins Variationsverfahren einbezogen und in ^{28}Si werden zwölf Nukleonen frei variiert. Als Symmetrie wird nur Isospinsymmetrie vorausgesetzt, dies scheint gerechtfertigt, durch die beobachteten großen Energiedifferenzen zwischen Eigenwerten gleichen Spins und gleicher Parität aber unterschiedlichen Isospins. Es bringt Erleichterung bei der Lösung der Newton-Raphson-Gleichungen. Der Modellraum, in dem die Variationsgleichungen durch

variation der Entwicklungskoeffizienten gelöst werden, umfaßt in allen Fällen die 2s-1d-Schale. Zu erwarten sind also nur Zustände positiver Parität. In diesem endlichen Unterraum läßt sich der Hamilton-Operator exakt diagonalisieren und besitzt die folgenden Einteilchenenergien:

$$\varepsilon_{1d5/2} = -4.14 \text{ MeV}$$

$$\varepsilon_{1d3/2} = 0.94 \text{ MeV}$$

$$\varepsilon_{2s1/2} = -3.27 \text{ MeV}$$

Da wir uns in unseren Untersuchungen hauptsächlich auf vergleichende Aussagen innerhalb dieser Arbeit stützen, spielt es nur eine untergeordnete Rolle, welche Kernkraft wir benutzen. Wir haben uns deshalb für eine Gauss-Rosenfeld-Kraft entschieden

$$V(r) = V_0 ((\tau_1 \cdot \tau_2) / 3) (0.3 + 0.7 \sigma_1 \cdot \sigma_2) e^{-(r/\mu)^2}$$

mit

$$V_0 = 53.25 \text{ MeV} \quad \text{und} \quad \mu = 1.66 \text{ fm}$$

die recht akzeptable Ergebnisse in Hartree-Fock-Rechnungen in der s-d-Schale, besonders für Interbandlevel-Beschreibungen ergibt ²⁾.

In zukünftigen Rechnungen sollten mehr realistische Wechselwirkungen, die z.B. Tensorkräfte enthalten, benutzt werden.

IV.2.1. Orthogonale Basis

Die EHF-Gleichungen ⁹⁾ sind die gewöhnlichen HF-Gleichungen mit einer zusätzlichen Orthogonalitätsbedingung

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0 \quad m = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

die für jeden neu hinzukommenden Zustand $|\psi_n\rangle$ erfüllt sein muß. Die Orthogonalitätsbedingung projiziert die in $|\psi_n\rangle$ vertretenen Komponenten des bereits vorhandenen Konfigurationsraumes aus, so daß sich mit jedem neuen Zustand $|\psi_n\rangle$ die Dimension des Variationsraumes um eins erhöht. Die Lösungen der Variationsgleichungen korrespondieren ⁹⁾ so zu den 0-ten, 1-ten, 2-ten usw. N-ten angeregten Zuständen des Systems. Unsere Basis ist nicht groß genug, daß wir Zustände mit gutem Drehimpuls über CM-Methoden herausprojizieren könnten, wir benutzen PAV-Verfahren, um die Symmetrien zu restaurieren und so eine bessere Konvergenz zu erhalten.

Um den Konfigurationsraum zu konstruieren, projizieren wir nach der Variation die Drehimpulskomponenten J aller Zustände heraus. Da die Drehimpulsprojektion sich aus Drehungen zusammensetzt, verändert sie Quantenzahlen (J_z -Quantenzahl). Die Orthogonalitätsrelation, die zwischen verschiedenen Zuständen $|\psi_n\rangle, |\psi_m\rangle$ gilt, muß für die J -Komponenten der Zustände nicht erfüllt sein. Es kann sogar geschehen, daß in der Normmatrix

$$P_J^{nm} := \begin{pmatrix} \langle \psi_0 | \hat{P}_J | \psi_0 \rangle & \dots & \langle \psi_0 | \hat{P}_J | \psi_k \rangle & \dots & \langle \psi_0 | \hat{P}_J | \psi_N \rangle \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ & & \langle \psi_k | \hat{P}_J | \psi_k \rangle & & \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & & & \langle \psi_N | \hat{P}_J | \psi_N \rangle \end{pmatrix}$$

lineare Abhängigkeiten erzeugt werden. Mit der EHF-Methode erwartet man, daß die Nebendiagonalelemente der Hamilton-Matrix des Konfigurationsraumes

$$H_J^{nm} := \begin{pmatrix} \langle \psi_0 | \hat{H} \hat{P}_J | \psi_0 \rangle & \dots & \langle \psi_0 | \hat{H} \hat{P}_J | \psi_k \rangle & \dots & \langle \psi_0 | \hat{H} \hat{P}_J | \psi_N \rangle \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ & & \langle \psi_k | \hat{H} \hat{P}_J | \psi_k \rangle & & \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & & & \langle \psi_N | \hat{H} \hat{P}_J | \psi_N \rangle \end{pmatrix}$$

von den Diagonalelementen dominiert werden, so daß schon wenige Basiszustände ausreichen, um das Verfahren gegen die ersten Zustände des Spektrums konvergieren zu lassen. In Abb. 1⁹⁾ werden die Ergebnisse der EHF-Rechnungen in ²⁰Ne mit den Ergebnissen der exakten Schalenmodell Diagonalisation verglichen. Die mit A bezeichneten Energielevels sind die der unprojizierten Zustände selbst, B bezeichnet die Energien der projizierten intrinsischen Zustände und C die Ergebnisse der CM-Rechnungen, die mit D, den exakten Schalenmodellrechnungen verglichen, eine

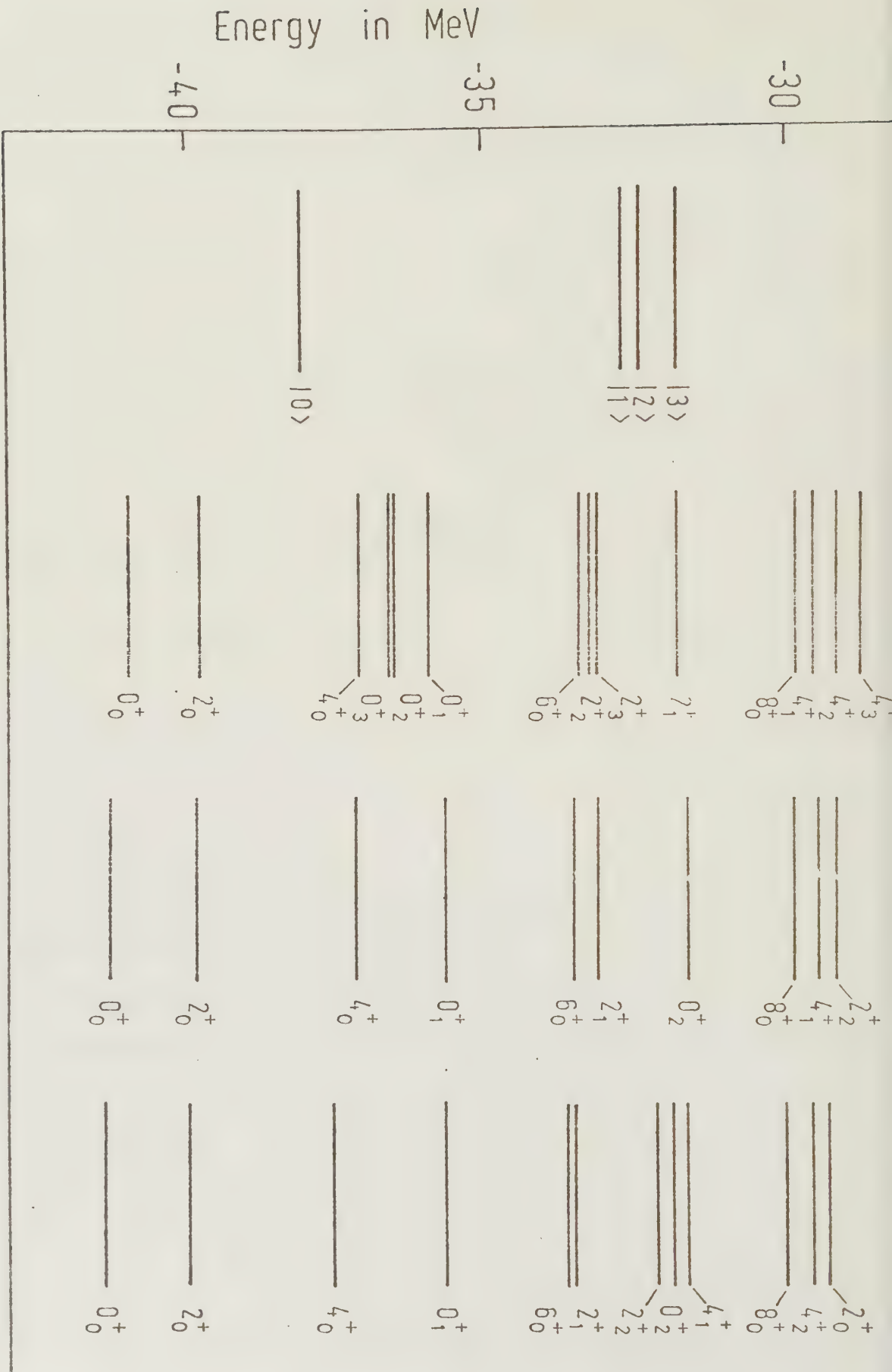


Abb. 1

Vergleich der EHF-Ergebnisse in ^{20}Ne mit den Ergebnissen der exakten Schalenmodell-Diagonalisation. Die Energieniveau-Verteilung (A) gibt die Ergebnisse der unprojizierten EHF-Zustände, (B) der dreimpulsprojizierten EHF-Basis (von jedem intrinsischen Basiszustand), (C) der CM-Rechnungen mit vier dreimpulsprojizierten Basiszuständen und (D) der Schalenmodell-Diagonalisation wieder. In allen Fällen sind nur die niedrigsten Zustände aufgetragen. (Diese Abb. ist aus Ref. 9 entliehen.)

ausgezeichnete Übereinstimmung zeigen. Aber es zeigt sich auch, daß das gesamte Grundzustandsband O_O^+ bis 8_O^+ bereits ohne CM-Rechnungen seinen Platz besetzt hält, was für die Gültigkeit der HF-Gleichungen im Grundzustand des ^{20}Ne -Systems spricht. Die Konvergenz gegen die ersten zwei Zustände des O^+ Spektrums ist hervorragend, auch der O_2^+ -Zustand ist noch in akzeptabler Übereinstimmung, was beweist, daß sich mit wenigen Zuständen bereits eine gute Konvergenz gegen die exakten Schalenmodell-Werte erhalten läßt.

IV.2.2. Die Hartree-Fock-Basis

Die Orthogonalitätsbedingung, die sich als Stärke des Verfahrens in ^{20}Ne herausstellt, kann sich durchaus in größeren Vielteilchensystemen und ausgedehntem Modellraum als nachteilig erweisen. Grund dafür ist, daß die Variationsgleichungen, mit denen sukzessiv Lösungen erzeugt werden, immer bei der n-ten Lösung gleichzeitig die Orthogonalitätsrelation zu allen n-1 bereits gefundenen Lösungen erfüllen müssen.

In größeren Systemen kann dies zu rechenzeitaufwendigem Suchen führen, bedenkt man doch, daß nach einer Lösung für jeden Satz der Hartree-Fock-Gleichungen suchen, gleichbedeutend ist mit dem Auffinden eines globalen Minimums. Andererseits ist durch die Orthogonalitätsbedingung keineswegs gewährleistet, daß lineare Abhängigkeiten nach der

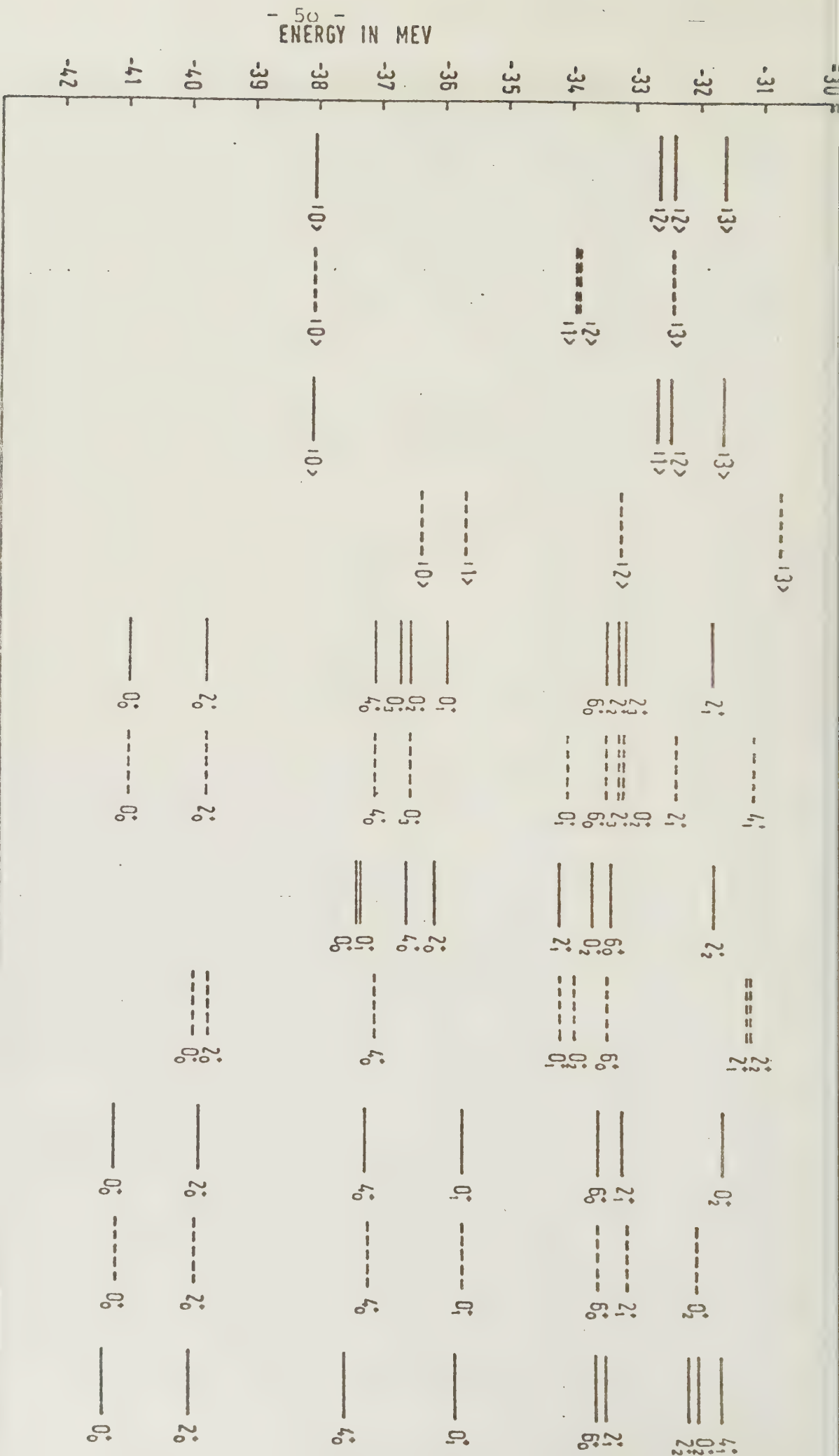


Abb. 2a Vergleich der HF-Ergebnisse (----) mit den EHF-Ergebnissen (—) (Ref. 9) und mit den Ergebnissen der exakten Schalenmodell-Diagonalisation. Die Energieniveau-Verteilung (A) gibt die unprojizierten HF, (B) die unprojizierten aber reorthogonalisierten HF-Basiszustände, (C) drehimpulsprojizierte HF (von jedem intrinsischen Basiszustand), (D) drehimpulsprojizierte HF nach der Reorthogonalisierung und (E) CM-Rechnungen mit vier drehimpulsprojizierten Basiszuständen. In allen Fällen sind nur die niedrigsten Zustände aufgetragen (Ref. 22).

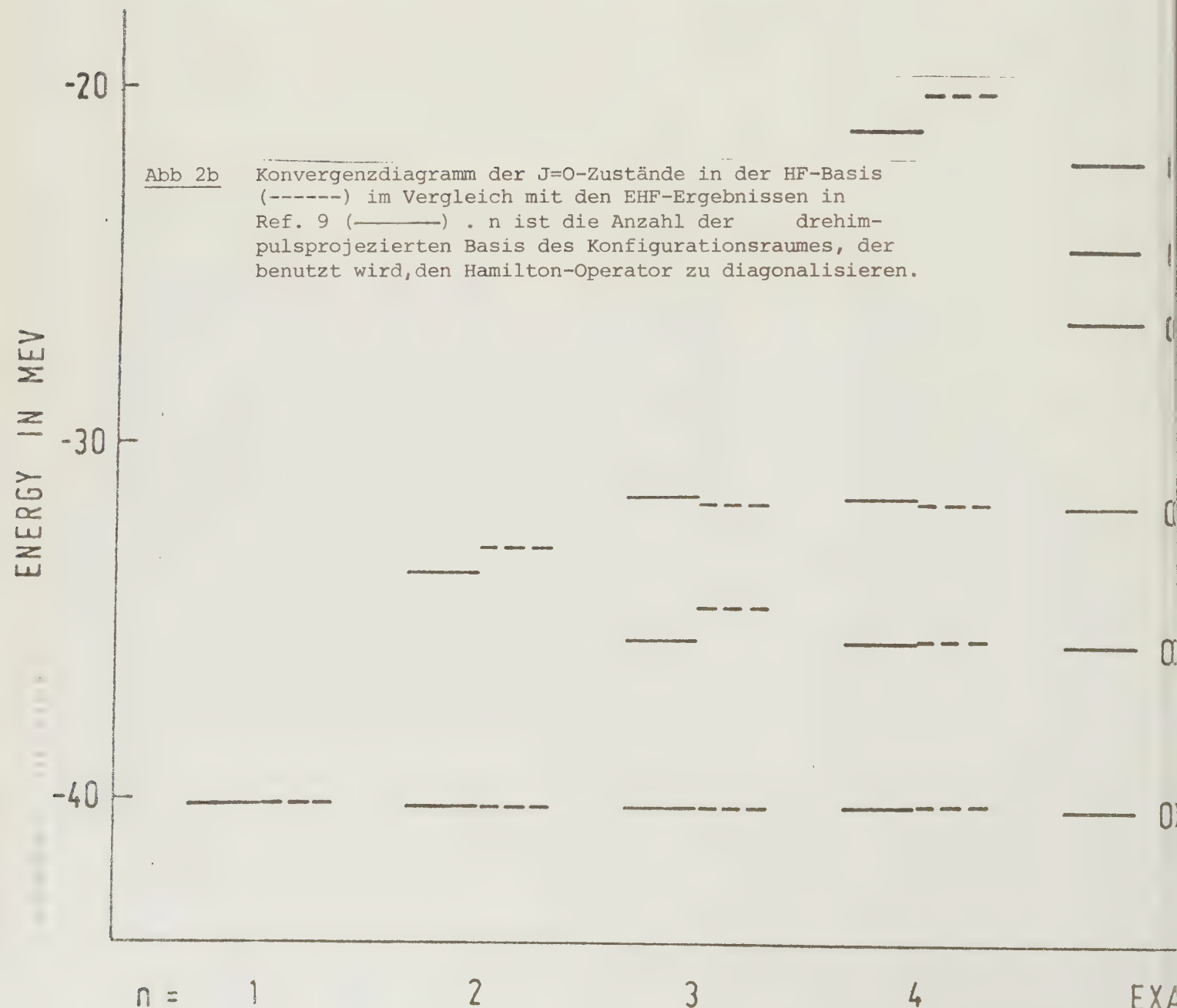
Projektion auf Drehimpulseigenzustände ausgeschlossen sind. Wir haben deshalb die Orthogonalitätsbedingung weggelassen und einfach die Hartree-Fock-Gleichungen zur Erzeugung eines Basissatzes herangezogen. Dabei sind wir so verfahren, daß wir sehr sorgfältig Lösungen erzeugt haben, die wir dann in eine monoton wachsende Folge nach ihren Variationsenergien angeordnet haben. Die ersten N -Zustände haben wir als Basiszustände des Konfigurationsraumes ausgewählt und die Drehimpulsprojektionen durchgeführt. Bereits beim Diagonalisieren der Normmatrix P_j^{nm} zeigen sich dann eventuell lineare Abhängigkeiten, so daß an dieser Stelle leicht ein $(N+1)$ -ter Zustand hinzugenommen werden kann, der einen der N -Zustände ersetzt.

In Abb. 2²²⁾ sind die Ergebnisse der HF-Variationsgleichungen im Vergleich mit den EHF-Gleichungen zu sehen.

Die Anzahl der Basiszustände, die wir in diesen CM-Rechnungen benutzt haben, ist $N=4$, genau so viele wie im Falle der EHF-Gleichungen. Wir haben die HF-Zustände durch Diagonalisieren der Normmatrix reorthogonalisiert - und zwar vor und nach der Projektion -, um sie mit den EHF-Zuständen vergleichen zu können (Abb. 2a, B und D). Es gibt offensichtlich keine Relation, die die beiden Sätze verbindet, was, weil die Basissätze Lösungen verschiedener Sätze von Variationsgleichungen sind, zu erwarten war.

Dies zeigt sich ganz deutlich in Abb. 2a, B und D. Erst nach den CM-Rechnungen stimmen die niedrig-liegenden Energielevels überein.

Zu einem ähnlichen Ergebnis kommt der Konvergenzplot in Abb.2b, in dem die Konvergenz zu den ersten drei 0^+ Zuständen gezeigt wird. Es gibt keine nennenswerten Unterschiede zwischen den Ergebnissen der EHF- und der HF-Gleichungen als Basisgeneratoren des Konfigurationsraumes, was natürlich sehr dafür spricht, daß nur von Bedeutung ist, Lösungen von Variationsgleichungen zur Erzeugung des Konfigurationsraumes heranzuziehen und weniger, wie diese beschaffen sind.



IV.2.3. Drehimpulsgewichtete Basis.

Einerseits sind wir daran interessiert, eine adäquate Beschreibung des niedrig-liegenden Eigenwertspektrums einer gegebenen J-Komponente zu geben, die uns in die Lage versetzt, zum Beispiel Niveauverteilungen zwischen J^+ -Banden zu berechnen oder elektromagnetische Übergangsstärken zu bestimmen. Genauso wie die Berechnung von Hochspinzuständen in Gebieten, wo entweder "backbanding" oder "yrast-traps" stattfinden, reagieren diese Größen sehr empfindlich auf die zugrunde gelegte Kerndynamik.

Andererseits ist es - besonders in großen Modellräumen - ausgesprochen schwierig - wenn nicht gar unmöglich - alle auf Drehimpulseigenzustände projizierten Matrixelemente der Hamilton-Matrix H_J^{mn} zu berechnen. Unmöglich für PBV-Methoden, die in einer irreduziblen Darstellung arbeiten und schwierig mit PAV-Verfahren. Ein "kleinerer" Konfigurationsraum, dessen Eigenwerte rascher gegen die niedrig-liegenden exakten Energiespektren konvergieren, könnte die Probleme der Projektion auf Drehimpulseigenzustände erheblich verringern.

Als vorteilhaft in diesem Sinne könnten sich die CHF-Gleichungen erweisen, die aufgrund ihrer Drehimpulszwangsbedingung

$$\hat{J}^2 = J(J+1)$$

in die Lage versetzen, die gewünschten J-Komponenten in den Lösungen verstärkt zu erzeugen.

Konstruiert man nun aus den Lösungen der CHF-Gleichungen einen Satz von Basiszuständen derart, daß man aus einer monoton wachsenden Folge ihrer Variationsenergien, gerade die N ersten Lösungen auswählt und projiziert man im Anschluß an das Variationsverfahren auf die gewünschten Eigenzustände, so sollte man eigentlich einen idealen Satz von Basiszuständen ausgewählt haben, der eine rasche Konvergenz gegen die niedrig-liegenden Eigenzustände des J-Bandenspektrums garantiert.

Ein noch weitreichender Aspekt ergibt sich durch das Benutzen der CHF-Gleichungen. Angenommen, die Lösungen der CHF-Gleichungen besitzen sehr starke Vertreter in den gewünschten J-Komponenten, was für jeden Zustand durch die Berechnung des Erwartungswertes $\langle \hat{P}_J \rangle$ zu überprüfen ist, so lassen sich die $|\psi^n(J)\rangle$ als approximative Basiszustände einer irreduziblen Darstellung auffassen. Führt man mit dieser Basis CM-Rechnungen ohne zusätzliche Drehimpulsprojektion durch, so sollten auch die Rechnungen in der Lage sein, näherungsweise das niedrig-liegende Eigenspektrum der gewünschten J-Werte zu beschreiben. Diese Rechnungen lassen sich ohne große Schwierigkeiten auf sehr große Vielteilchensysteme ausdehnen und der Modellraum, in dem die Variationsgleichungen gelöst werden, läßt sich einfach erweitern. Sie eignen sich sehr gut zur approximativen Beschreibung von Niveauverteilungen zwischen Banden.

Wir haben die CHF-Gleichungen zur Erzeugung eines Basisatzes benutzt und ihr Verhalten in CM-Rechnungen untersucht. Da wir nicht nur am Grundzustand interessiert

sind, sind wir wie mit den anderen Sätzen von Variationsgleichungen verfahren. Gelöst wurde das Variationsproblem

$$\delta \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = 0$$

mit der zusätzlichen Zwangsbedingung

$$\langle \hat{J}^2 \rangle = J(J+1)$$

3)

mit dem Newton-Raphson-Verfahren. Diese Methode erlaubt uns, Lösungen zu finden, die zu verschiedenen Einteilchen-orbitalen korrespondieren und nach Lösungen $|\psi(J)\rangle$ der CHF-Gleichungen zu suchen, die von einer bestimmten Wahl von J abhängen und deren Variationsenergie

$$E_J = \langle \psi(J) | \hat{H} | \psi(J) \rangle$$

am niedrigsten ist.

Im Fall $J=6$ gab es keine Schwierigkeiten, die Lösungen der CHF-Gleichungen zu erhalten und wie wir vorher schon gezeigt haben, ist die Variationsenergie der tiefsten Lösung in guter Übereinstimmung mit der Energie des 6^+ Zustandes der Grundzustandsrotationsbande^{23,24,27)}. Dies trifft nicht zu für $J=0$ und für $J=2$ ²³⁾. Besonders für $J=0$, wo nur eine Lösung gefunden wurde, gibt es keine gute Übereinstimmung zwischen der tief-liegenden Lösung von $J=0$ und der korrespondierenden Grundzustandsbande²³⁾. In den meisten Fällen wurden eine Reihe von entarteten Lösungen zur selben Variationsenergie aber mit verschiedenen Erwartungswerten von $\hat{J}_z$ gefunden. In diesen Fällen wurden für den Fall $J=6$ die

Tabelle 1a

E_J [MEV]	-33.942	-31.350	-31.201	-29.051	-27.887	-26.960	-26.351	-25.275	-24.928	-24.000
$\langle \hat{J}_z \rangle$	5.38	4.97	5.17	5.08	5.38	5.15	5.16	4.48	4.67	5.17
λ [MEV]	.149	.049	.028	.027	.004	.084	-.051	-.085	-.010	-.068
C_{6-6}^2	.598-04		.541-03		.126-07	.118-06	.296-04	.107-06	.577+00	.658+00
C_{6-5}^2									.184+00	.208-01
C_{6-4}^2	.123-03	.123-02	.325-03	.759-03	.409-06	.409-05	.762-04	.617-05	.109-04	.235-05
C_{6-2}^2	.402-03		.303-03		.199-04	.151-04	.223-03	.686-04	.101-06	
C_{6-1}^2				.199-02						
C_{60}^2	.157-02	.158-02	.304-03		.935-03	.282-03	.781-03	.128-02		
C_{62}^2	.704-02		.306-02	.159-01	.649-02	.152-02	.597-02	.223-01		
C_{64}^2	.378-01	.283-01	.152-01		.406-01	.924-01	.466-01	.141+00		
C_{65}^2				.167+00						
C_{66}^2	.328+00		.179+00		.365+00	.301+00	.333+00	.194+00		
$C_6^2 = \sum_K C_{6K}^2$	.375+00	.311-01	.199+00	.185+00	.413+00	.395+00	.387+00	.359+00	.761+00	.679+00

Tab. 1a Tabelliert sind die charakteristischen Werte der zehn Basiszustände der CHF-J=6-Basis. E_J ist der Erwartungswert der HF-Energie $E_J = \langle \Psi(J) | \hat{H} | \Psi(J) \rangle$, $\langle \hat{J}_z \rangle$ die im Mittel zu erwartende J_z -Quantenzahl. λ gibt den Wert des Lagrange-Multiplikators $E_J' = E_J - \lambda J(J+1)$. Die $C_{6K}^2 = \langle \Psi(J) | \hat{P}_K^2 | \Psi(J) \rangle$ sind die Wahrscheinlichkeitsamplituden der verschiedenen K-Komponenten von $J=6$ und $C_{J=6}^2$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude von $J=6$ summiert über alle J_z -Komponenten K.

Tabelle 1b

E_J [MEV]	-35.837	-32.911	-31.300	-29.788	-.29.602	-29.580	-29.485	-29.366	-22.054	-20.810
$\langle \hat{J}_z \rangle$	.0	.0	.0	.0	-.005	.0	.0	.0	.0	-.0
λ [MEV]	-.362	.298	.358	.648	.701	.721	.694	.732	2.210	2.81
C_{2-2}^2			.214+00	.127-08	.139-01	.129-10	.608-09			
C_{2-1}^2				.630-08	.427-02	.681-09	.824-09			
C_{20}^2	.348+00	.509+00	.879-01	.505-07	.600-02	.385+00		.232-01	.557+00	.498+00
C_{21}^2				.631-08	.197-02	.681-09	.822-09			
C_{22}^2			.214+00	.129-08	.125-01		.645-09			
$C_{2K}^2 = \sum_K C_{2K}^2$	.348+00	.509+00	.516+00	.629-07	.386-01	.385+00	.299-08	.232-01	.557+00	.498+00

Tab. 1b Tabelliert sind die charakteristischen Werte der zehn Basiszustände der CHF-J=2-Basis. E_J ist der Erwartungswert der HF-Energie $E_J = \langle \psi(J) | \hat{H} | \psi(J) \rangle$, $\langle \hat{J}_z \rangle$ die im Mittel zu erwartende J_z -Quantenzahl. λ gibt den Wert des Lagrange-Multiplikators $E'_J = E_J - \lambda J(J+1)$ Die $C_{2K}^2 = \langle \psi(J) | \hat{P}_K^2 | \psi(J) \rangle$ sind die Wahrscheinlichkeitsamplituden der verschiedenen K-Komponenten von J=2 und $c_{J=2}^2$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude von J=2 summiert über alle J_z -Komponenten K.

Tabelle 2a

$E_{HF} [MEV]$	-38.050	-33.880	-32.346	-31.281	-29.177	.28.856	-27.888	-27.036	-26.332	-23.422
C_{6-6}^2				.354-01	.141-07		.255-04			
C_{6-5}^2					.181-05		.138-04			
C_{6-4}^2			.165-01	.721-02	.862-04		.181-03			
C_{6-3}^2					.187-02		.291-03			
C_{6-2}^2				.277-02	.177-01		.119-02			
C_{6-1}^2					.548-01		.727-02			
C_{6-0}^2	.120+00		.460-02	.105-02	.114-01		.376-01	.397-01	.125+00	.483-01
C_{6-1}^2					.548-01		.106+00			
C_{6-2}^2				.277-02	.177-01		.142+00			
C_{6-3}^2					.187-02		.917-01			
C_{6-4}^2			.165-01	.721-02	.498-05	.277+00	.269-01			
C_{6-5}^2					.181-02		.257-02			
C_{6-6}^2				.354-01	.141-07		.971-04			
$C_{6-K}^2 = \sum_K C_{6K}^2$	.120+00		.376-01	.918-01	.160+00	.277+00	.416+00	.397-01	.125+00	.483-01

Tab. 2a Tabelliert sind die Hartree-Fock-Energien $E_{HF} = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ und die Wahrscheinlichkeitsamplituden $c_{J=6, K}^2 = \langle \Psi | \hat{P}_{K, J=6}^2 | \Psi \rangle$ der verschiedenen K-Komponenten und deren Wahrscheinlichkeiten $c_{J=6}^2$ summiert über alle J_z -Quantenzahlen K der HF-Basis für den Fall $J=6$.

Tabelle 2b

$E_{HF} [\text{MEV}]$	-38.050	-33.880	-32.346	-31.281	-29.177	-28.856	-27.888	-27.036	-26.332	-23.422
$C_2^2 \text{ } -2$				.123+00	.995-03		.145-02			
$C_2^2 \text{ } -1$					.426-01		.382-02			
$C_2^2 \text{ } 0$	.415+00		.224+00	.147+00	.276+00		.780-02	.523+00	.147+00	.855-01
$C_2^2 \text{ } 1$					.426-01		.117-01			
$C_2^2 \text{ } 2$				.123+00	.950-03		.618-02			
$C_2^2 = \sum_K C_{6K}^2$	.415+00		.224+00	.394+00	.372+00		.605-01	.523+00	.147+00	.855-01

Tab. 2b Tabelliert sind die Hartree-Fock-Energien $E_{HF} = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ und die Wahrscheinlichkeitsamplituden $c_{J=2 \text{ } K}^2 = \langle \Psi | \hat{P}_K^{J=2} | \Psi \rangle$ der verschiedenen K-Komponenten und deren Wahrscheinlichkeitsamplituden $c_{J=2}^2$, summiert über alle J_z -Quantenzahlen K der HF-Basis für den Fall $J=2$.

Lösungen, deren Erwartungswert von $\hat{J}_z$ um 5 lag und im Fall $J=2$ $\langle \hat{J}_z \rangle \approx 0$ als Basiszustände ausgewählt. In den Tabellen 1a und 1b sind die Variationsenergien, die Lagrange-Multiplikatoren, die Erwartungswerte von $\hat{J}_z$ und die Wahrscheinlichkeitsamplituden

$$C_{gk}^2 = \langle \psi(j) | \hat{p}_k^2 | \psi(j) \rangle$$

- wobei $\hat{p}_k^2$ der Drehimpulsprojektor ist - von den 10 niedrigsten Lösungen der CHF-Gleichungen für den Fall $J=6$

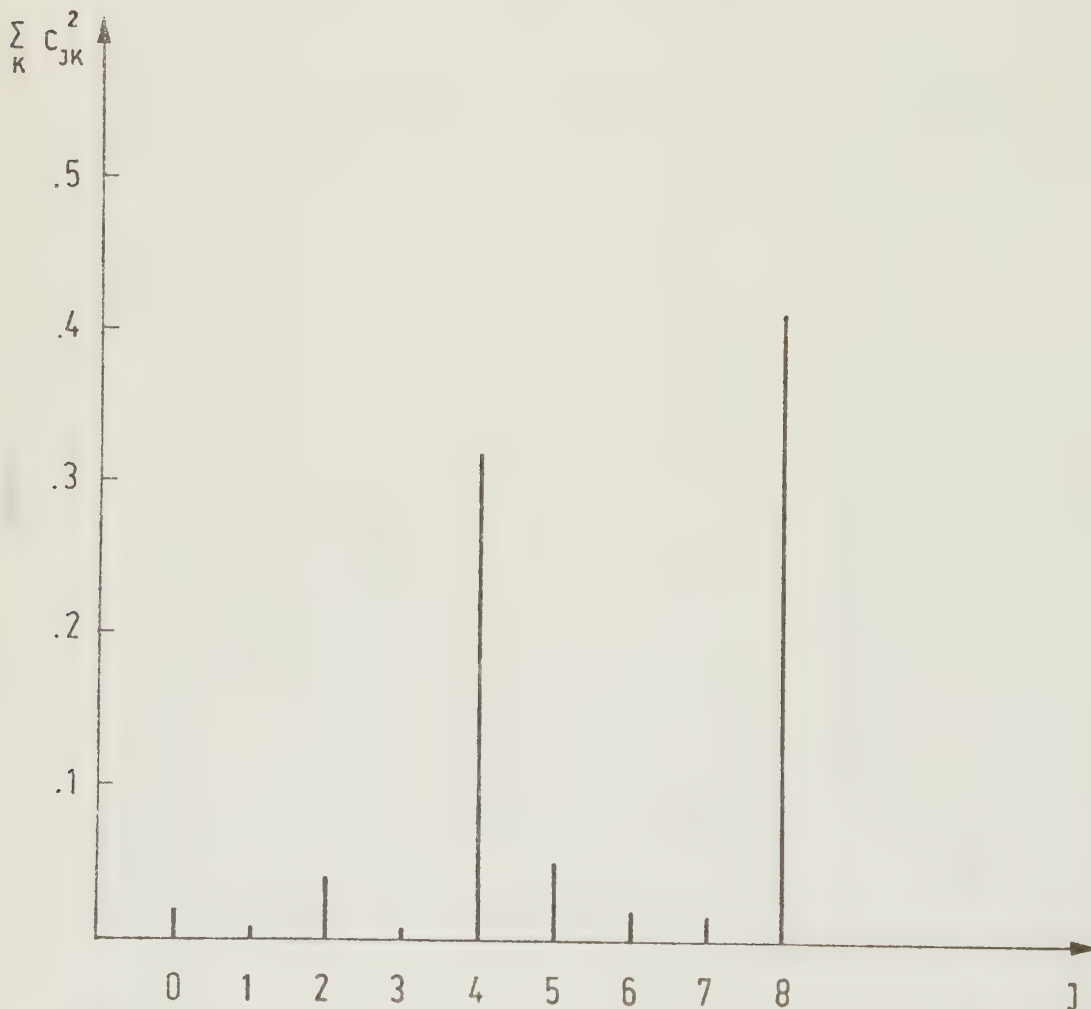


Abb. 3

Diese Abbildung zeigt eine mögliche typische Verteilung eines "unechten" CHF-Zustandes aus der CHF-J=6-Basis, für den die Zwangsbedingung $\langle J^2 \rangle = J(J+1)$ zwar erfüllt ist, dessen Wahrscheinlichkeitsamplituden $c_{J=6}^2$ aber nur starke Vertreter auf den Nachbardrehimpulsen besitzen und auf J=6 nur minimal vertreten sind.

$$|\psi^{n=2}(j=6)\rangle$$

in 1a und $J=2$ in 1b aufgetragen. Zum Vergleich sind in Tabelle 2a und 2b die Wahrscheinlichkeitsamplituden von den Lösungen der HF-Gleichungen aufgezeichnet und zwar in 2a für $J=6$ und in 2b für $J=2$. Wie erwartet, sind die Amplituden der CHF- $J=6$ -Basis (Tabelle 1a) gegenüber den Amplituden der HF-Lösungen (Tabelle 2a) stark betont. Im Falle $J=2$ (Tabelle 1b) sind hingegen die "echten" Vertreter der erzwungenen J -Komponente geringer gegenüber den HF-Lösungen. Unter "echten" Vertretern verstehen wir die, deren Erwartungswert $\langle \hat{J}^2 \rangle$ stark gepeakt ist, und nicht wie in Abb.3 etwa nur die Nachbarkomponenten vertreten sind, und die J -Komponente selbst nicht.

Mit den drehimpulsprojizierten Zuständen der CHF-Lösungen für $J=6$ und $J=2$ haben wir CM-Rechnungen durchgeführt, und zwar so, daß wir zunächst nur die am häufigsten vertretenen K -Komponenten der Basis berücksichtigten. In den CHF-Lösungen für $J=6$ ist dies $K=6$ (Abb.4a) und im Fall $J=2$, $K=0$ (Abb.4b). Zum Vergleich mit den CHF-Rechnungen zeigen die Abbildungen 5a und 5b die entsprechenden Ergebnisse der HF-Basis. Hier ist die beherrschende K -Komponente $K=0$ ausgewählt worden. Im Falle der CHF-Basis für $J=6$ verbleiben fünf von zehn Zuständen (Abb.4a), die linear unabhängig sind, während in der HF-Basis nur zwei Zustände zu den CM-Rechnungen beitragen (Abb.5a). Im Falle der PAV- CHF-Basis sind es vier linear unabhängige Zustände (Abb.4b) und der entsprechenden HF-Basis (Abb.5b) sind es sieben (vergleiche dazu auch die Tabellen 1a, 1b, 2a, 2b).

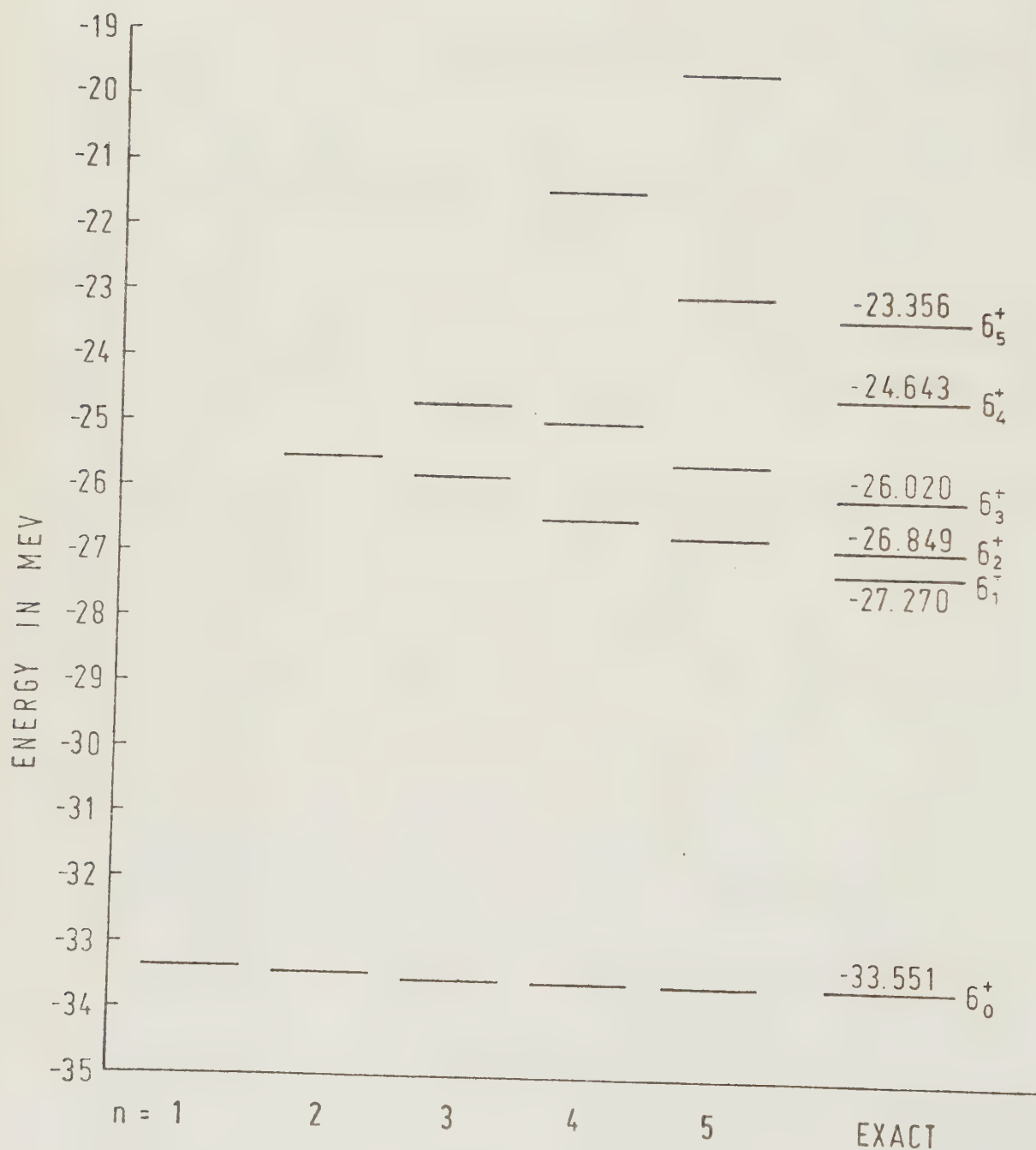


Abb. 4a Konvergenzdiagramm der linear unabhängigen $J=6$ Zustände, der dominanten $K=6$ Komponente in der PAV-CHF- $J=6$ -Basis im Vergleich mit den exakten Ergebnissen. n ist die Anzahl der auf Drehimpulseigenzustände $J=6$ projizierten Basiszuständen des Konfigurationsraumes, die benutzt werden, den Hamilton-Operator zu diagonalisieren.

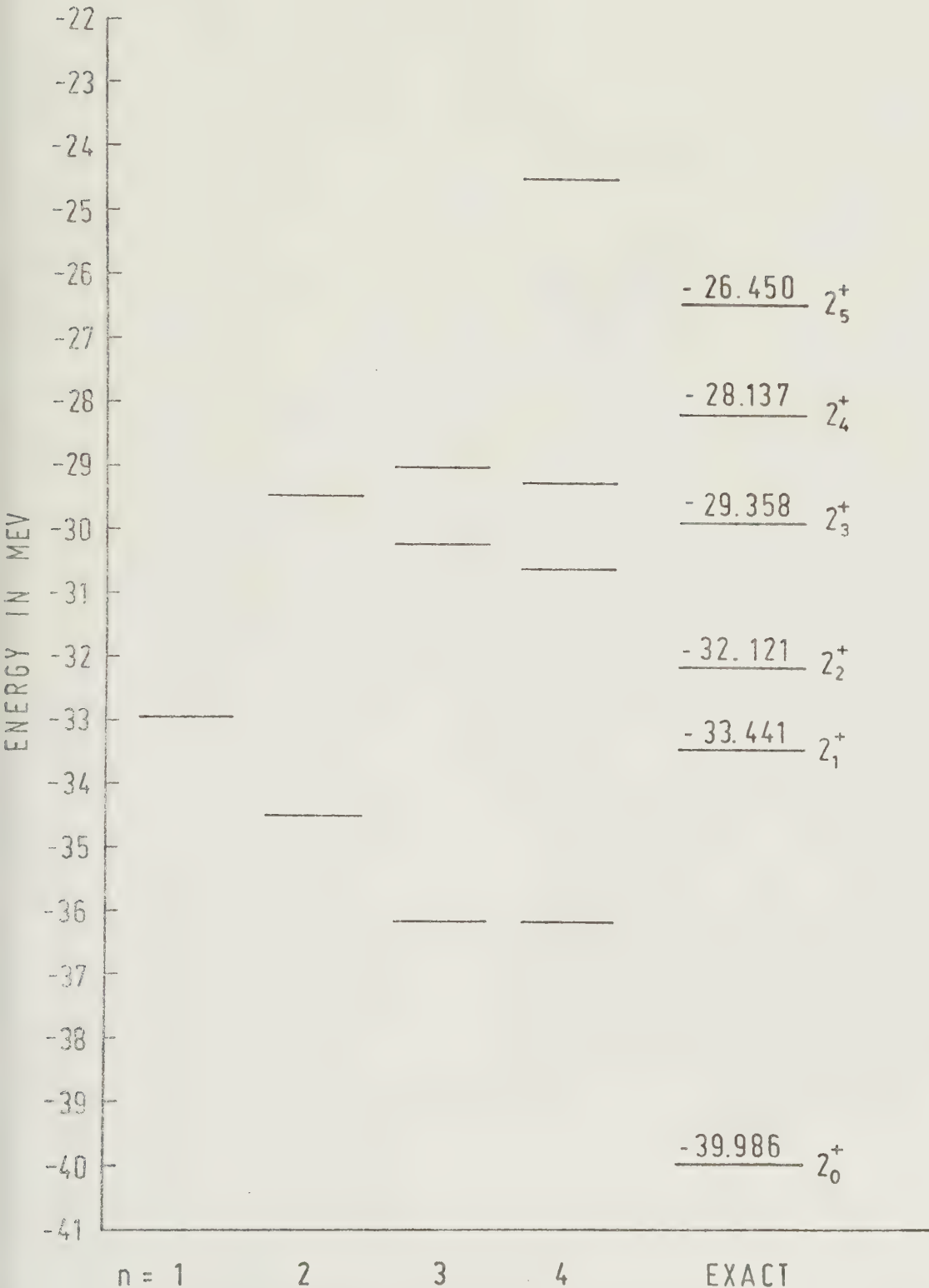


Abb. 4b

Konvergenzdiagramm der linear unabhängigen $J=2$ Zustände, der dominanten $K=0$ Komponente in der PAV-CHF- $J=2$ -Basis im Vergleich mit den exakten Ergebnissen. n ist die Anzahl der auf Drehimpulseigenzustände $J=2$ projizierten Basiszuständen des Konfigurationsraumes, die benutzt werden, den Hamilton-Operator zu diagonalisieren.

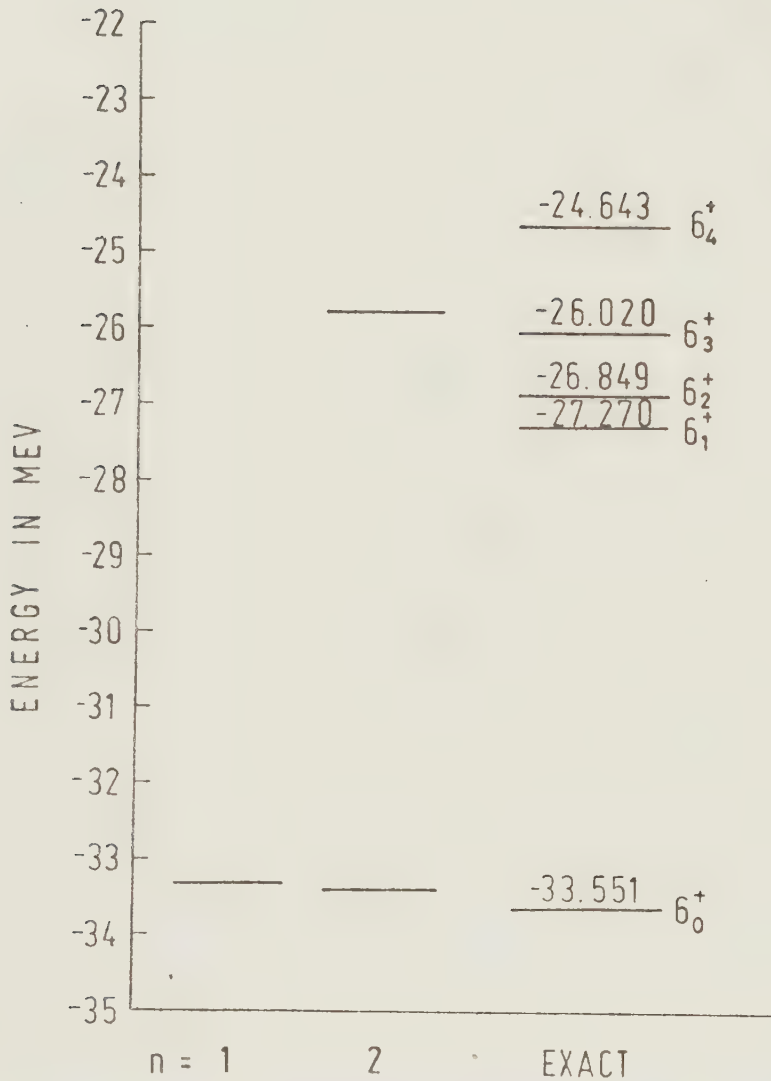


Abb. 5a Konvergenzdiagramm der linear unabhängigen $J=6$ Zustände der dominanten $K=0$ Komponente in der PAV-HF-Basis im Vergleich mit den exakten Ergebnissen. n ist die Anzahl der auf Drehimpulseigenzustände $J=6$ projizierten Basiszuständen des Konfigurationsraumes, die benutzt werden, den Hamilton-Operator zu diagonalisieren.

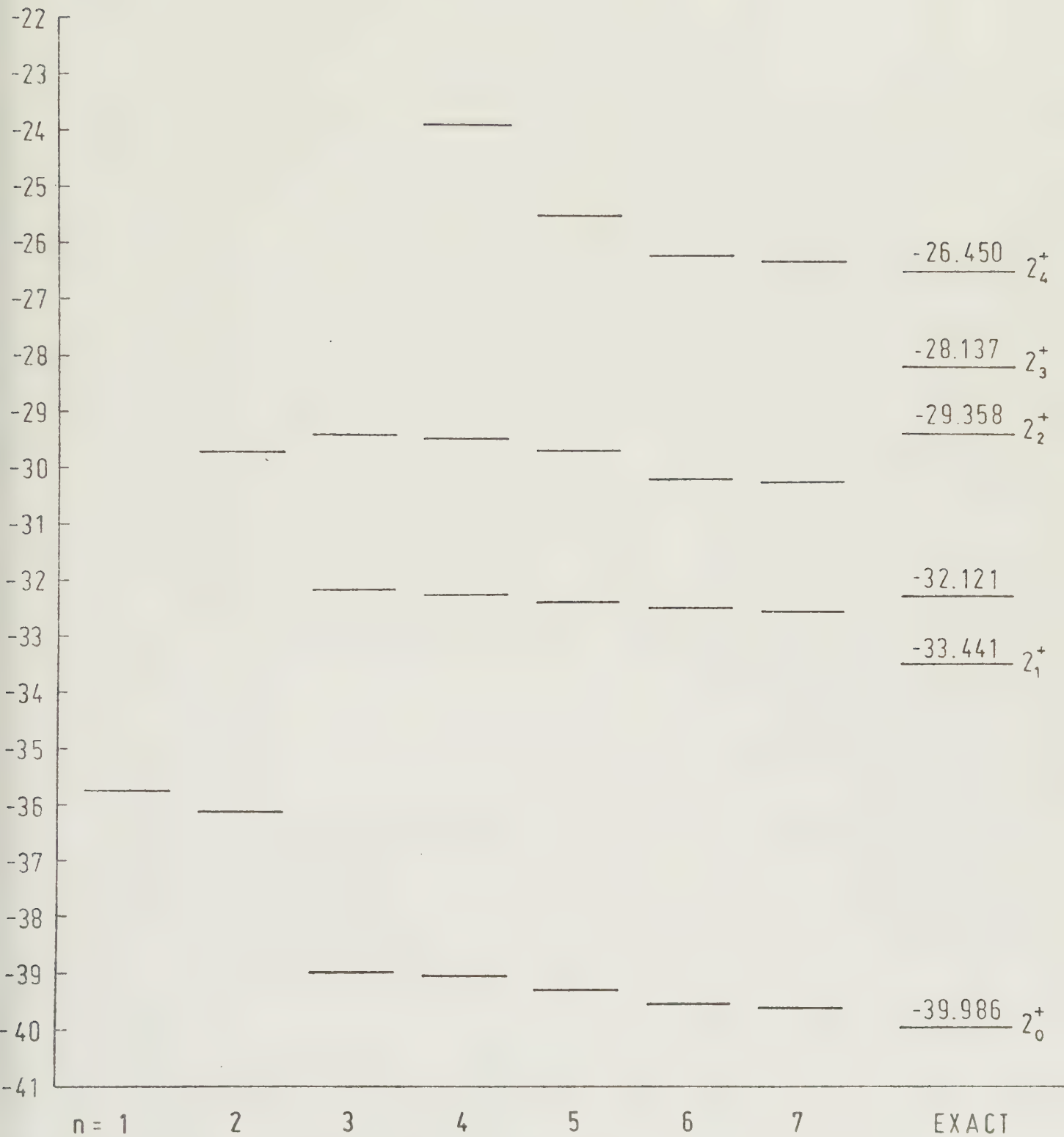


Abb. 5b Konvergenzdiagramm der linear unabhängigen $J=2$ Zuständen der dominanten $K=0$ Komponente in der PAV-HF-Basis im Vergleich mit den exakten Ergebnissen. n ist die Anzahl der auf Drehimpulseigenzustände $J=2$ projizierten Basiszuständen des Konfigurationsraumes, die benutzt werden, den Hamilton-Operator zu diagonalisieren.

Während die PAV- CHF-Basis in Abb.4a etwas besser erscheint als die PAV- HF-Basis in Abb.5a, verhalten sich die Ergebnisse für den Fall $J=2$ wie von der Auswahl der linear unabhängigen Zuständen zu erwarten - gerade umgekehrt. In den 6^+ -Spektren (Abb.4a und 5a) ist außer mit 6_0^+ kaum eine Übereinstimmung mit den exakten niedrigliegenden Spektrum festzustellen. In Abb.4a (CHF-Basis mit $J=2$) fehlt selbst diese Übereinstimmung, das liegt daran, daß der 2_0^+ in der CHF-Basis nicht stark genug vertreten ist ²³⁾. Ein Ausweg wäre, den $J=2$ Vertreter der HF-Basis mit in die CHF-Basis zu übernehmen - wie wir es in einer folgenden CM-Rechnung noch praktizieren werden.

Daß diese Ergebnisse nicht so beeindruckend sind, hat seine Ursache darin, daß wir für unsere PAV-Basis eine K-Komponente ausgewählt haben. Da nun aber jede Lösung der Variationsgleichungen eine Kombination der Eigenzustände $|\alpha JK\rangle$ ist

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha JK} c_{\alpha JK} |\alpha JK\rangle$$

α bezeichnet die verschiedenen Eigenzustände, ist nicht notwendig, daß derselbe Eigenzustand in jeder K-Komponente vertreten ist. Dadurch kann bei der Auswahl nur einer K-Komponenten zur Konstruktion des Konfigurationsraumes, Information verloren gehen.

Um dies zu verhindern, haben wir CM-Rechnungen mit K-gemischten PAV-Basiszuständen durchgeführt

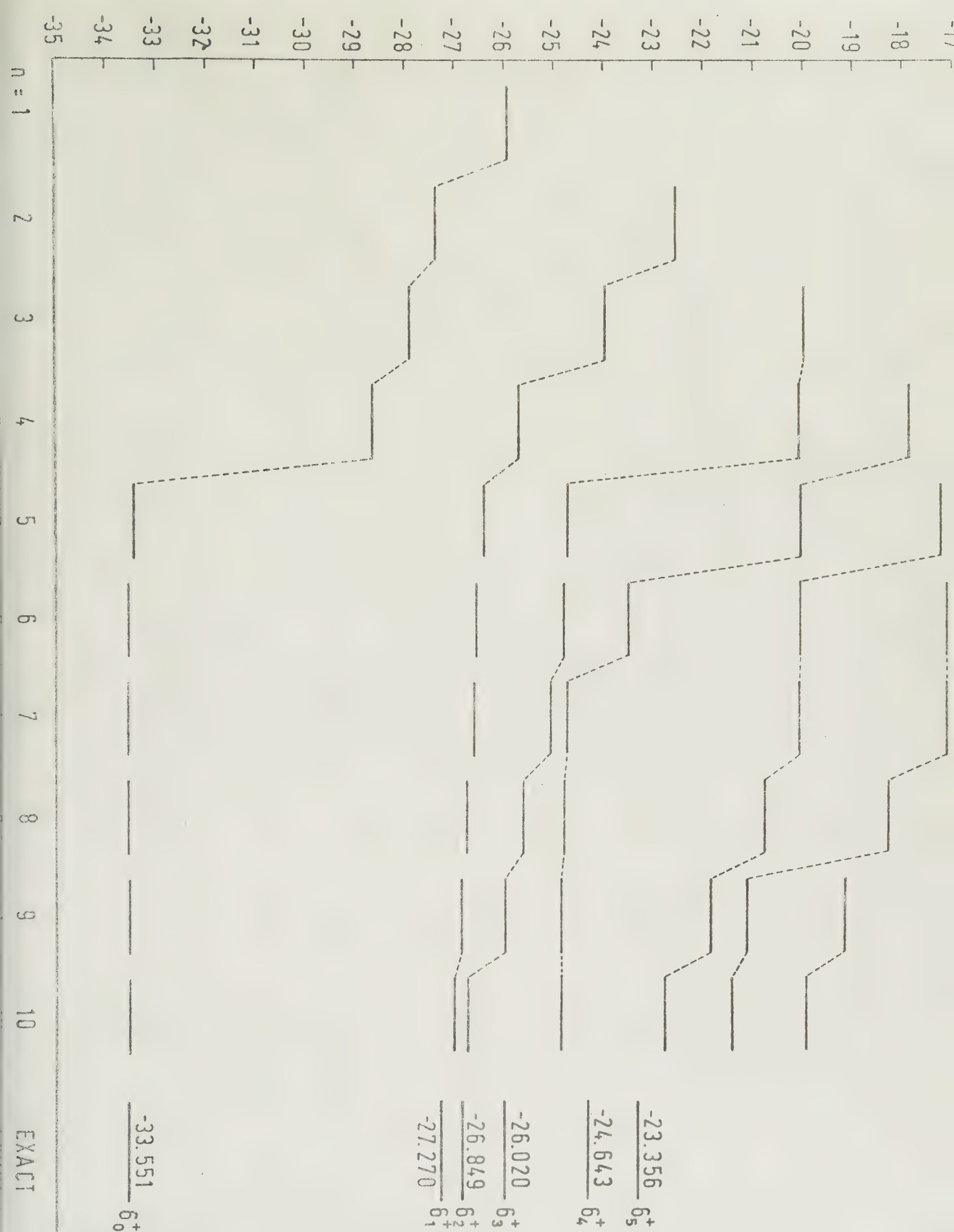


Abb 6a

Konvergenzdiagramm der linear unabhängigen $J=6$ Zustände, der K-gemischten PAV-CHF- $J=6$ -Basis im Vergleich mit den exakten Ergebnissen. n ist die Anzahl der auf Drehimpulseigenzustände $J=6$ projizierten Basiszuständen des Konfigurationsraumes, die benutzt werden, den Hamilton-Operator zu diagonalisieren.

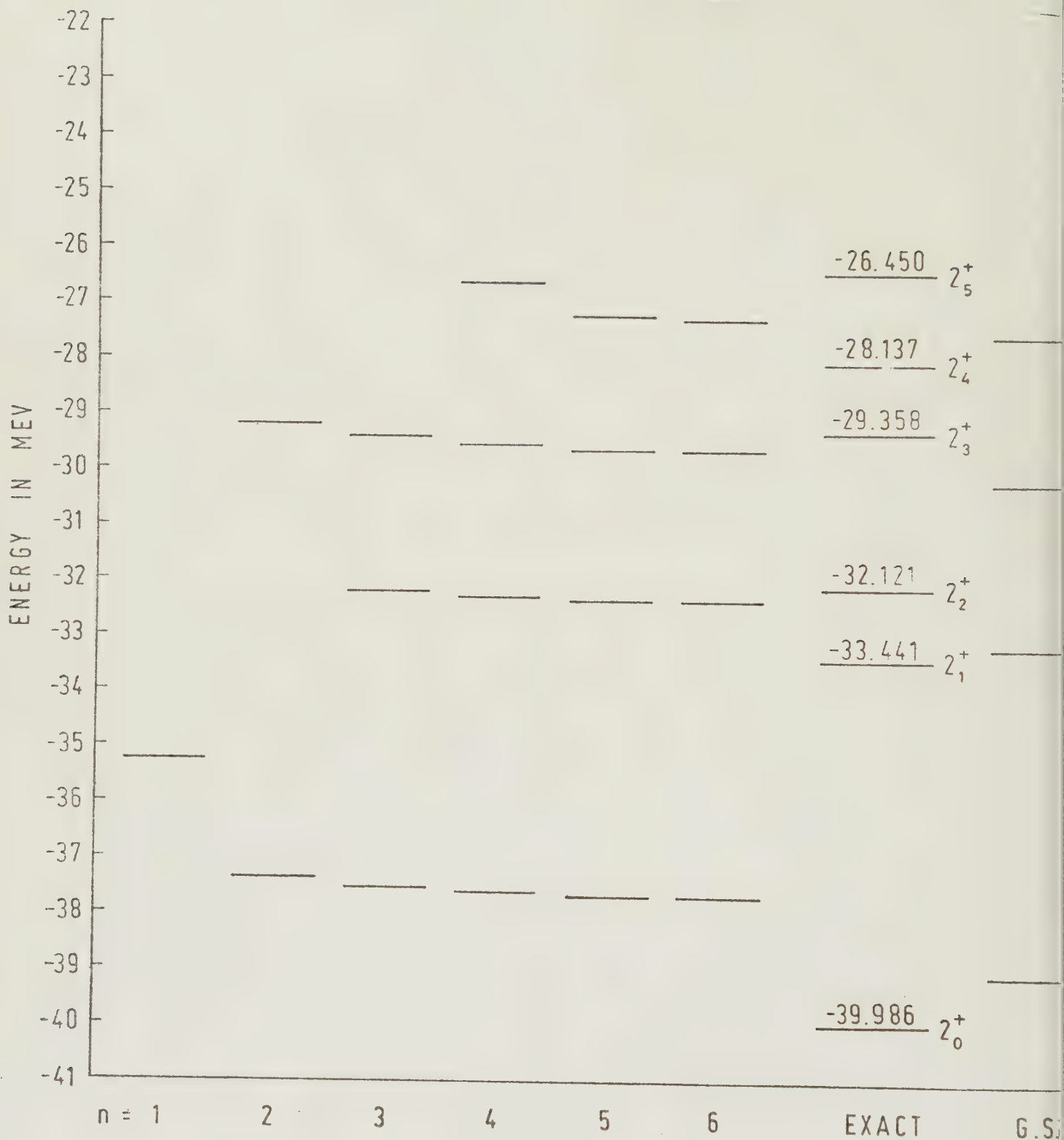


Abb. 6b Konvergenzdiagramm der linear unabhängigen $J=2$ Zustände, der K-gemischten PAV-CHF- $J=2$ -Basis im Vergleich mit den exakten Ergebnissen. n ist die Anzahl der auf Drehimpulseigenzustände $J=2$ projizierten Basiszustände des Konfigurationsraumes, die benutzt werden, den Hamilton-Operator zu diagonalisieren. G S bezeichnet den HF-Grundzustand, den wir als letzten Basiszustand in die CM-Rechnungen mit aufgenommen haben.

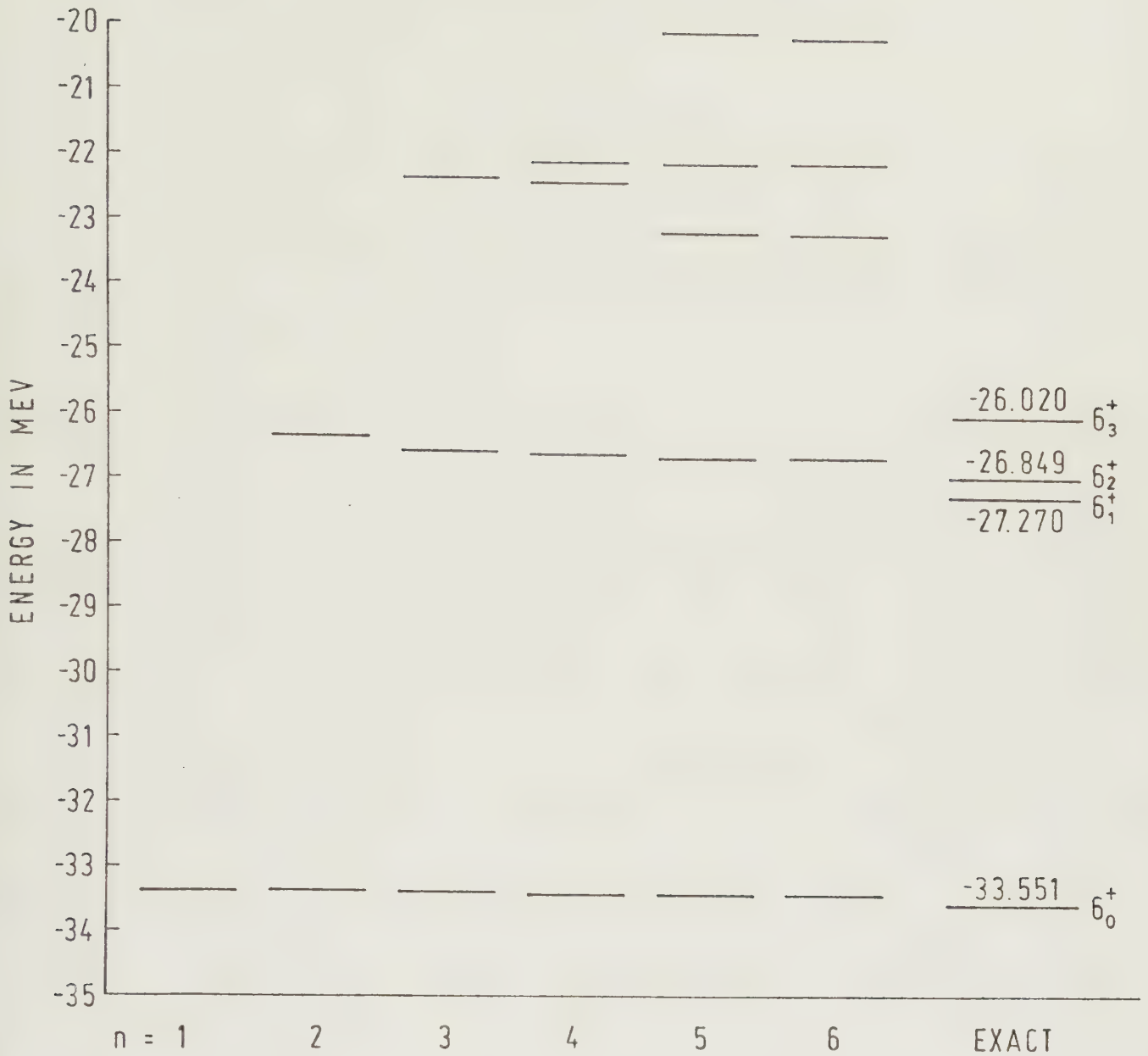


Abb. 7a Konvergenzdiagramm der linear unabhängigen $J=6$ Zustände der K-gemischten PAV-HF-Basis im Vergleich mit den exakten Ergebnissen. n ist die Anzahl der auf Drehimpulseigenzustände $J=6$ projizierten Basiszuständen des Konfigurationsraumes, die benutzt werden, den Hamilton-Operator zu diagonalisieren.

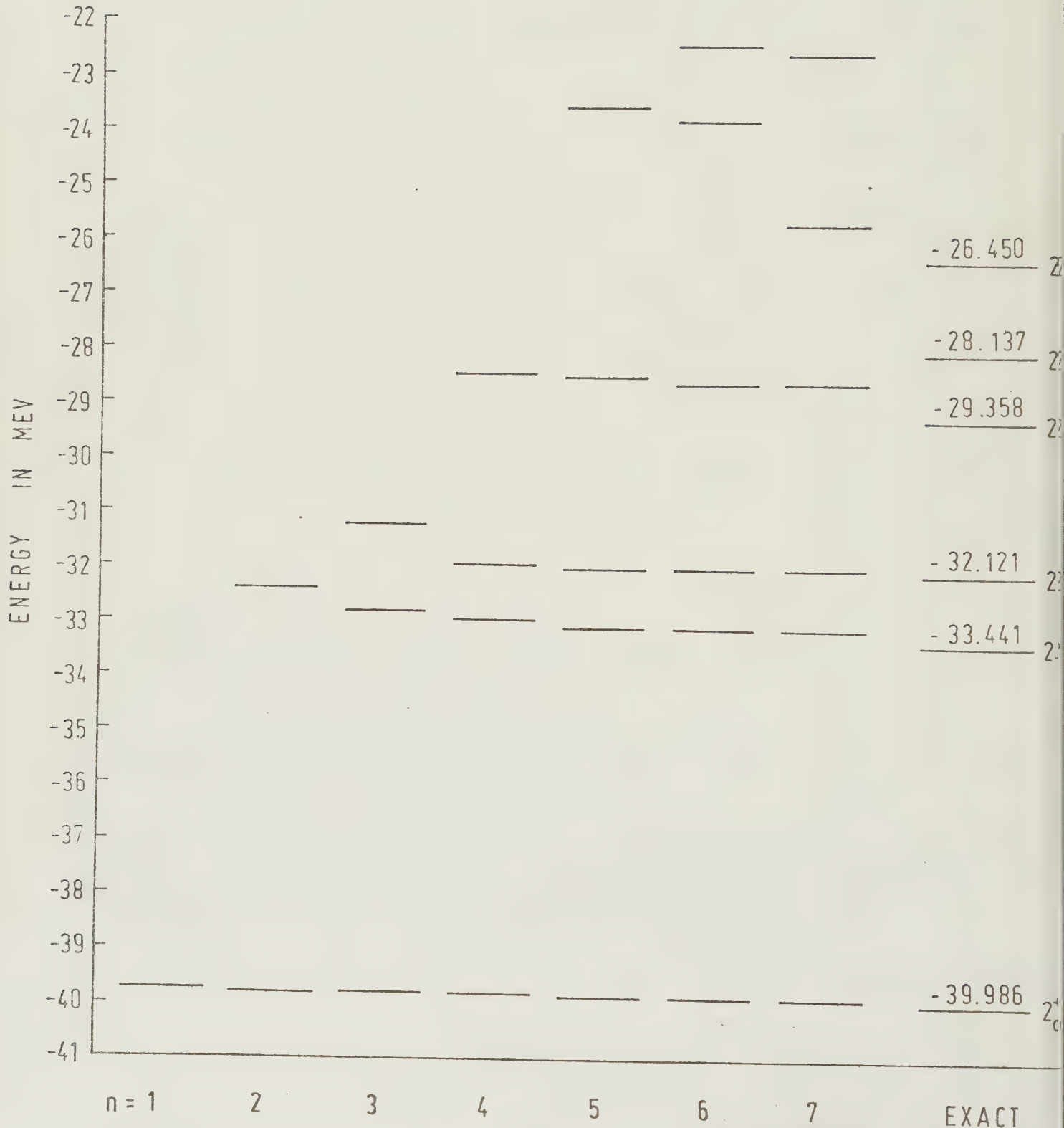


Abb. 7b Konvergenzdiagramm der linear unabhängigen $J=2$ Zustände der K-gemischten PAV-HF-Basis im Vergleich mit den exakten Ergebnissen. n ist die Anzahl der auf Drehimpulseigenzustände $J=2$ projizierten Basiszuständen des Konfigurationsraumes, die benutzt werden, den Hamilton-Operator zu diagonalisieren.

$$\sum_{k=1}^N \left\{ \langle \Psi_i | \hat{H} \sum_K \hat{P}_K^J | \Psi_k \rangle C_k^J - E^J \langle \Psi_i | \sum_K \hat{P}_K^J | \Psi_k \rangle C_k^J \right\} = 0$$

wobei N die Anzahl der Basiszustände ist, die in die CM-Rechnungen eingehen. Diese K -gemischten Eigenzustände sind, weil die skalare Wechselwirkung $\hat{H}$ die Entartung in K nicht aufhebt, ebenso Eigenfunktionen zum exakten Hamiltonoperator.

Die Ergebnisse der CM-Rechnungen dieser K -gemischten Basis sind für die CHF-Basis $J=6$ in Abb.6a, für $J=2$ in 6b aufgetragen. Zum Vergleich haben wir in Abb.7a und 7b wieder die Ergebnisse der entsprechenden HF-Basis daneben gestellt. Es fällt auf, daß in den CHF-Rechnungen und in der PAV- HF-Basis im Falle $J=6$ mehr Zustände linear unabhängig sind, was darauf hinweist, daß diese Sätze von Basiszuständen mehr Information tragen.

In Abb.7b, den Ergebnissen der HF- CM-Rechnung für den Fall $J=2$, ist die Anzahl der linear unabhängigen Zustände zwar die gleiche, aber das Konvergenzverhalten der K -gemischten Basis hat sich gegenüber den entsprechenden Ergebnissen in Abb.5b, drastisch verbessert.

Im Falle $J=6$ ist in der CHF-Basis die Anzahl der linear unabhängigen Zustände auf neun von zehn angewachsen, und es ist eine gute Übereinstimmung mit den niedrig-liegenden exakten Eigenwertspektren aus den Schalenmodell-Diagonalisierungsverfahren festzustellen (Abb.6a).

Während die ersten drei 6^+ -Zustände der CHF-Basis fast gegen die exakten Werte des Spektrums konvergiert sind,

ist es in der PAV- HF-Basis nur der 6_0^+ Zustand (Abb.7a) der gut reproduziert wird, woraus man schließen muß, daß es in der HF-Basis noch einiger weiterer Zustände bedarf, um die beiden ersten angeregten 6^+ -Niveaus, die sehr dicht beisammen liegen, zu beschreiben. Im Vergleich der Abbn. 6b und 7b zeigt sich ein besseres Verhalten der PAV-HF-Basis als der PAV- CHF-Basis. Gegenüber sieben linear unabhängigen Basiszuständen in der HF-Basis (Abb.7b), die eine ausgezeichnete Wiedergabe der ersten drei 2^+ -Niveaus zeigt, sind in der K-gemischten CHF-Basis nur sechs von zehn drehimpulsprojizierten Zustände linear unabhängig; dies sind zwar mehr als im Falle $K=0$, aber zuwenig, um eine gute Beschreibung der ersten 2^+ -Zustände des Spektrums zu liefern (Abb.6b).

Es kommt hinzu, daß für $J=2$ mit den Lösungen der CHF-Gleichungen die Grundzustandskomponente nicht gut beschrieben wird und deren Anteile in den CM-Rechnungen fehlen. Deutlich wird dies bei der Hinzunahme des HF-Grundzustandes (Abb.6b, letzte Spalte ((GS)), der seine stärkste Komponente in $J=2$ (41.53 % , siehe Tabelle 2b) hat, wodurch die beiden tiefsten Zustände der CHF-Basis in die Nähe des 2_0^+ - und des 2_1^+ -Niveaus abgesenkt werden.

Es liegt in den Variationsgleichungen begründet, daß die CM-Rechnungen für verschiedene Drehimpulse unterschiedlich gute Ergebnisse liefern.

In der Basis der höheren J-Werte werden die Lösungen der CHF-Gleichungen überwiegend in der gestreckten Koppelung gefunden (J_z -Komponente in der 6^+ -CHF-Basis liegt bei $K \approx 5$). Die Zwangsbedingung in den CHF-Gleichungen versucht offensichtlich, das Hartree-Fock-Potential zu deformieren, während die HF-Zustände in den niedrigen J-Werten vorwiegend zu Lösungen in möglichst gering deformierten Potentialen tendieren und tiefer liegen in ihren Variationsenergien. Die CHF-Gleichungen reproduzieren diese tiefer liegenden Zustände in den niedrigen J-Werten nicht ²³⁾. Um die Wirkungsweise der CHF-Gleichungen zu verdeutlichen, haben wir in unseren CM-Rechnungen die Beispiele $J=2$ - und $J=6$ -Basis gesucht.

Die CM-Rechnungen in ^{20}Ne zeigen, daß für Drehimpulse J , für die die Lösungen der CHF-Gleichungen eine gute Beschreibung der Grundzustandsbande bieten, die CHF-Basis in der Lage ist, mit relativ wenig Zuständen die niedrigliegenden Eigenzustände des gewünschten J-Wertes zu beschreiben. In den Fällen, in denen die CHF-Gleichungen die Grundzustandsbande nicht genähert reproduzieren, ist zu überlegen, ob man nicht die starken Vertreter des HF-Grundzustandes zur Konstruktion des Konfigurationsraumes hinzunimmt.

Die Zwangsbedingung

$$\langle \dot{J}^2 \rangle = J(J+1)$$

bewirkt in den meisten Fällen eine starke Betonung der gewünschten Drehimpulskomponenten J . Um maximale Information zu garantieren, sollte man die PAV- K-gemischte Basis in den CM-Rechnungen benutzen.

In der PAV- CHF-Basis wird durch die Betonung der gewünschten Drehimpulskomponenten die Konvergenz beschleunigt, dadurch kommt man mit weniger Zuständen in den CM-Rechnungen aus. Es ergibt sich so gegenüber der HF-Basis ein Vorteil, der es ermöglicht, bei gleichem Rechenaufwand den Modellraum in der CHF-Basis größer zu wählen. Ein Vorteil, der sich natürlich teilweise dadurch wieder aufhebt, daß man sich bei den Lösungen der CHF-Gleichungen immer auf eine bestimmte Drehimpulskomponente J konzentriert, während man in der HF-Basis den Gleichungen die Freiheit läßt, Lösungen mit verteilten J -Komponenten zu erzeugen (was für das Konvergenzverhalten von Nachteil ist), man aber nach Projektion auf Drehimpulseigenzustände gleichzeitig CM-Rechnungen für alle J -Spektren durchführen kann.

Ist man wirklich nur daran interessiert, bestimmte niedrig-liegende J -Energieniveau-Spektren eines Vielteilchensystems in großen Modellräumen zu berechnen, so daß diese einen ersten Überblick über die Dynamik der benutzten effektiven Wechselwirkung geben, so kann man

sich fragen, ob die CHF-Lösungen nicht genähert eine approximative Drehimpulsprojektion vor der Variation bewirken. CM-Rechnungen - ohne zusätzliche aufwendige Drehimpulsprojektionen mit dieser Basis durchgeführt, wären in der Lage, ausgesprochen komplexe Vielteilchensysteme in ausgedehnten Modellräumen zu behandeln²⁴⁾.

Wir haben Basissätze der CHF-Lösungen für $J=6$ und $J=2$ benutzt und mit ihnen CM-Rechnungen ohne zusätzliche Drehimpulsprojektion durchgeführt. Die Ergebnisse sind in den Abb. 8a und 8b aufgetragen. Dabei haben wir aus den jeweils zehn Basiszuständen, die Zustände, die zwar eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf den Nachbarkomponenten, nicht aber auf den durch die Zwangsbedingung $\langle \hat{J}^2 \rangle$ favorisierten J -Wert selbst haben (siehe z.B. Abb. 3), aus den CM-Rechnungen herausgelassen. In der $J=6$ -Basis sind dies die Basiszustände 2, 3 und 4 (siehe Tabelle 1a), die alle eine Wahrscheinlichkeitsamplitude $C_{j=6}^2 < .2$ haben. In der $J=2$ -Basis sind es vier Zustände, die wir herausgenommen haben und zwar 4, 5, 7 und 8 die eine Wahrscheinlichkeitsamplitude $C_{j=2}^2 < .1$ haben (siehe Tab. 1b).

Die Ergebnisse, die wir mit den verbleibenden sieben unprojizierten CHF-Basiszuständen aus den CM-Rechnungen erhalten, sind in Abb. 8a aufgetragen. Das Spektrum, das man erhält, gibt verschoben um 500 KeV überraschend gut die Verteilung der exakten Schalenmodell-Rechnungen wieder. Vergleicht man die Anregungsenergien der ersten drei angeregten Zustände zu dem tiefsten 6^+ -Zustand,

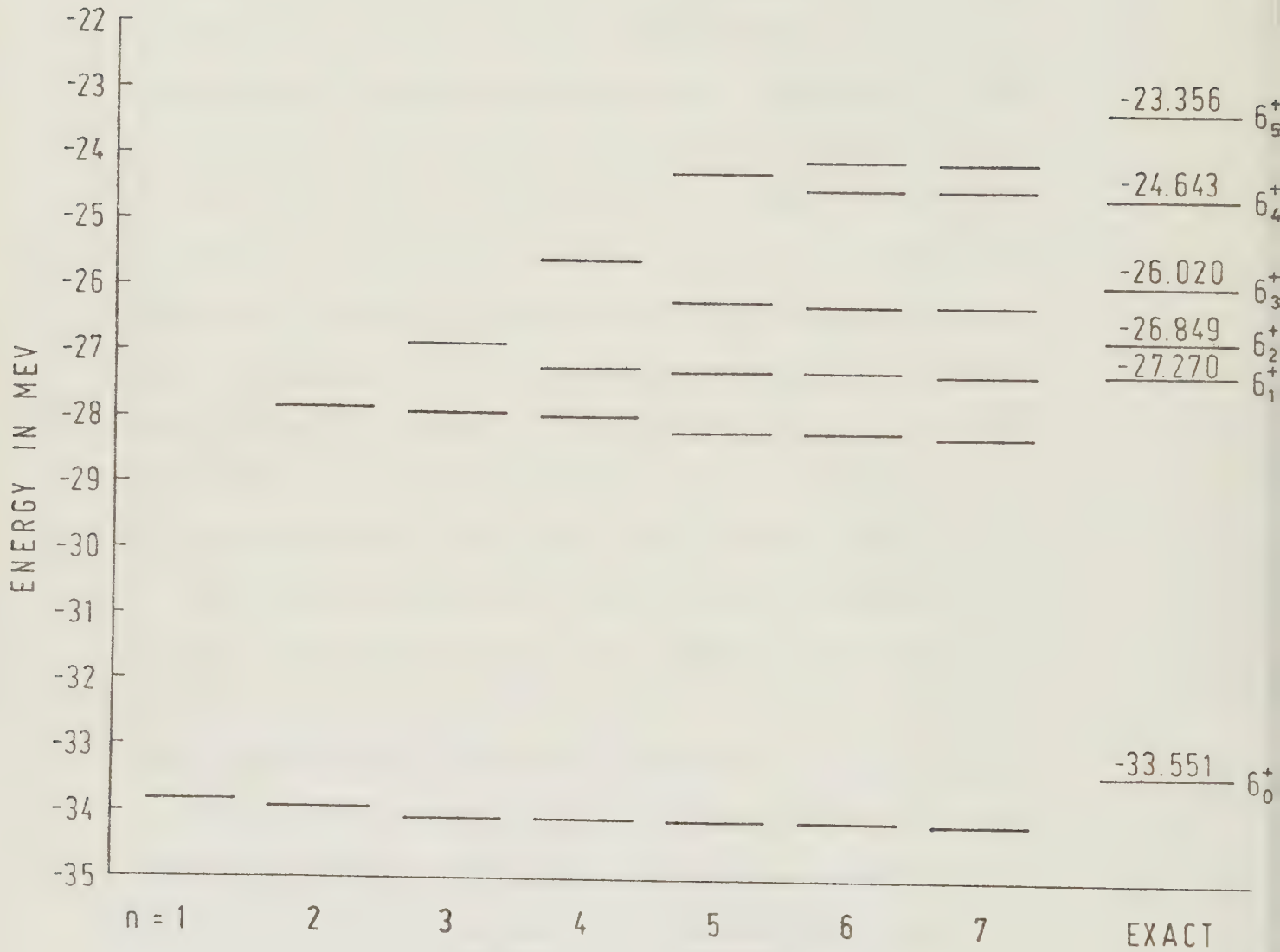


Abb. 8a Konvergenzdiagramm der $J=6$ Zustände $|\Psi(J)\rangle$ der CHF- $J=6$ -Basis in CM-Rechnungen ohne zusätzliche Drehimpulsprojektion. n ist die Anzahl der approximativen Drehimpulseigenzustände $|\Psi(J)\rangle$ des Konfigurationsraumes, die benutzt werden, den Hamilton-Operator zu diagonalisieren.

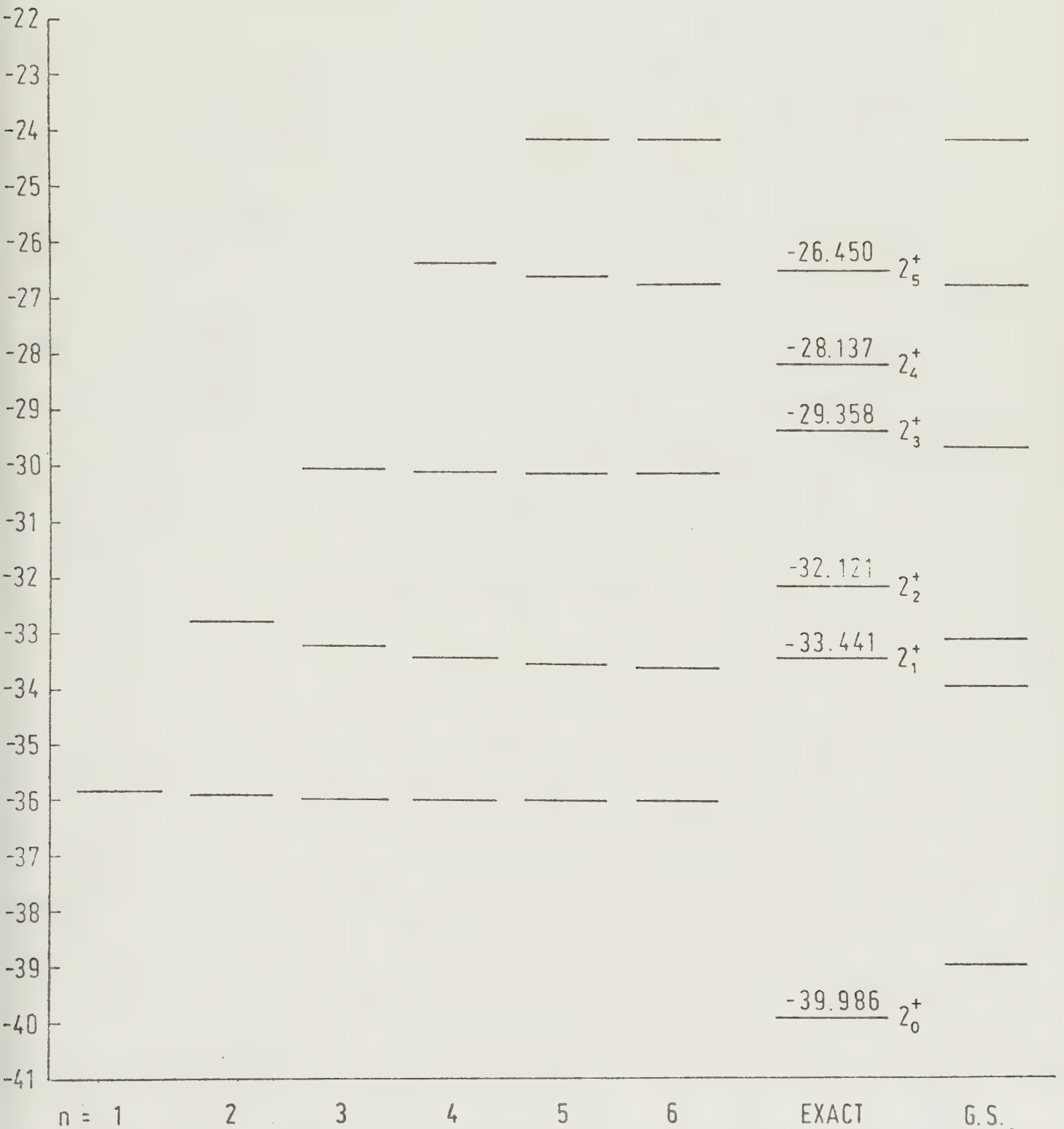


Abb. 8b Konvergenzdiagramm der $J=2$ Zustände $|\Psi(J)\rangle$ der CHF- $J=2$ -Basis in CM-Rechnungen ohne zusätzliche Drehimpulsprojektion. n ist die Anzahl der approximativen Drehimpulseigenzuständen $|\Psi(J)\rangle$ des Konfigurationsraumes, die benutzt werden den Hamilton-Operator zu diagonalisieren. G S bezeichnet den HF-Grundzustand, den wir als letzten Basiszustand in die CM-Rechnungen mit aufgenommen haben.

so ist die Übereinstimmung zwischen CHF-Anregungsenergien und exakten Schalenmodellanregungsenergien verblüffend, besonders auch deshalb, weil man mit sehr wenig Basiszuständen auskommt.

Im Fall $J=2$ sieht das Ergebnis nicht so gut aus. Die Ursache hierfür liegt darin begründet, daß in diesem Basissatz eine adäquate Beschreibung der Grundzustandsbande für $J=2$ fehlt ²³⁾. Die Hinzunahme des HF-Grundzustandes (siehe Abb.8b; GS) kann diese Lücke nicht schließen. Die Anregungsspektren, gemessen relativ zum tiefsten 2^+ -Zustand, geben nur qualitativ die Anregungsspektren der ersten vier 2^+ -Zustände aus Schalenmodell-Diagonalisierungsrechnungen wieder. Der wichtige Unterschied - auch hier - zwischen der 2^+ - und der 6^+ -Basis ist, daß man schon mit dem "richtigen" tiefsten Zustand in den CM-Rechnungen startet. In der $J=2$ -Basis ist das weniger gegeben als in der $J=6$ -Basis.

Die Beispiele in ^{20}Ne zeigen, daß man mit einer unprojizierten CHF-Basis in CM-Rechnungen bereits eine akzeptable Beschreibung bestimmter Interband-Niveau-Verteilungen erhalten kann. Die Drehimpulsprojektion nach der Variation wird hierbei umgangen. Man braucht nur den Projektor - der im allgemeinen keine Schwierigkeiten bereitet - zu berechnen, um Zustände der Art Abb.3 aus der CHF-Basis auszuschließen, was sich auch in komplexeren Vielteilchensystemen als ^{20}Ne und ausgedehnten Modellräumen einfach bewerkstelligen läßt.

IV.3. CM-Rechnungen in ^{28}Si

Entfernt von Bereichen abgeschlossener Hauptschalen besitzen Atomkerne vorzugsweise nicht-sphärische Strukturen. Besonders leichte deformierte Kerne weisen breite deformierte Gleichgewichtszustände auf, die ausgeprägter sind als z.B. in den seltenen Erden oder den schweren Actiniden. Vertreter leichter Kerne mit diesen Eigenschaften sind die $4n$ -Kerne in der s - d -Schale, zu denen auch ^{20}Ne gehört, das wir in den vergangenen Abschnitten behandelt haben. Die Deformation nimmt zu, je weiter man sich von den abgeschlossenen Hauptschalen entfernt, so ist z.B. ^{28}Si in der Mitte der s - d -Schale ein typischer Vertreter dieser Klasse.

Von den Hartree-Fock-Verfahren ist bekannt, daß sie zwar eine erste Approximation zur Beschreibung leichter deformierter Kerne darstellen, daß aber gerade die Lösungen der Hartree-Fock-Gleichungen mit den meisten Zweiteilchenwechselwirkungen in ^{28}Si nicht sehr gut mit den experimentellen Daten übereinstimmen. So sagt die Theorie in ^{28}Si zwei nahezu entartete und orthogonale tiefliegende Zustände voraus, deren Energiedifferenz wesentlich geringer ist als die vom Experiment zu erwartende. Dies besagt nicht, daß die Hartree-Fock-Methode grundlegend falsche Beschreibungen des ^{28}Si -Problems, dessen Rotationsstruktur stark gestört ist, liefert. Es besagt lediglich, daß die komplizierte Struktur von ^{28}Si in einem Slater-Determinanten-Zustand nicht unterzubringen ist. Eine Möglichkeit, das System ^{28}Si

besser zu beschreiben, bietet sich in den MCSCF-⁶⁾ Rechnungen. Ein einfaches Beispiel solcher MCHF-Rechnungen ist in der Behandlung des ^{28}Si -Problems in einem Bi-Determinanten intrinsischen Zustand (BDIS) von R. Shanker ²⁵⁾ vorgestellt worden. Hier wird hauptsächlich auf die Konstruktion der beiden tiefliegenden fast entarteten und orthogonalen HF-Lösungen abgehoben, indem ein Bi-Determinantenzustand konstruiert wird, der zueinander orthogonale Lösungen erzeugt. Es stellt sich heraus, daß die experimentelle Energiedifferenz mit dem BDIS nicht beschreibbar ist. Was wiederum nicht ausschließt, daß energetisch höher liegende Konfigurationen, die mit den tiefliegenden mischen, durchaus von Bedeutung sein können. Sie sollten in der Lage sein, die Teile der Wechselwirkung zu erfassen, die in den Variationsgleichungen fehlen. So gesehen ist ^{28}Si ein guter Test für unsere Methode, CM-Rechnungen in einem Konfigurationsraum durchzuführen, dessen Basiszustände aus den Lösungen von Hartree-Fock-Gleichungen erzeugt werden (siehe II.2).

In unseren Rechnungen haben wir ^{28}Si behandelt als besäße es im Innern einen ^{16}O -core und zwölf äußere Valenznukleonen (siehe IV.1.). Zur Konstruktion der Basis wurden die Hartree-Fock-Gleichungen benutzt (II.2.). Aus einer Anzahl von Lösungen haben wir neun ausgewählt, deren Variationsenergie am tiefsten liegt und die eine monoton wachsende Folge bilden. Von diesen neun Zuständen sind die beiden ersten axialsymmetrisch $K=0$. Die dritten, vierten und fünften Zustände sind Überlagerungen von ver-

schiedenen K-Komponenten mit $\Delta K = 2$. (ΔK ist der Differenzbetrag zweier benachbarter J_z -Komponenten) und die restlichen vier sind wieder axialsymmetrisch mit $K=0$. Die ersten beiden Zustände liegen sowohl in ihren Variationsenergien als auch in allen drehimpulsprojizierten Energien E_J dicht beisammen (siehe Tab.3). Die $J=0$ -Komponente ist - verglichen mit den übrigen J-Komponenten klein, der sphärisch-symmetrische Anteil ist nur schwach vertreten, d.h. die Zustände sind deformiert. Berechnet man ihren Energieüberlapp in den einzelnen Drehimpulskomponenten

$$H_J^{12} = \langle \psi_1 | \hat{H} \hat{P}^J | \psi_2 \rangle$$

so ergeben sich Werte H_J^{12} , die um etwa drei Größenordnungen kleiner sind als ihre entsprechenden Diagonalelemente, was besagt, daß die beiden Zustände nicht mischen. Aus ihren Überlappementen $\langle \psi_1 | \hat{P}^J | \psi_2 \rangle$ folgt, daß sie fast orthogonal sind. Ein ähnliches Ergebnis erhält R. Shanker²⁵⁾ mit der BDIS-Methode, die im Variationsverfahren zwei zueinander orthogonale Zustände erzeugt. Auch hier gibt es keine Beimischung des höheren zum tiefliegenden Zustand. Wir haben CM-Rechnungen mit diesen neun Zuständen durchgeführt. Dabei haben wir uns zunächst auf den Fall $J=0$ konzentriert und zwar deshalb, weil es

- a) am schwierigsten sein dürfte, die tiefliegenden $J=0$ -Zustände, die nur schwache Amplituden besitzen, zu reproduzieren,
- b) eine akzeptable Beschreibung der beiden tiefliegenden

Zustände mit anderen Verfahren ⁶⁾ nur unter großen Anstrengungen zu gewinnen ist und

- c) weil wir über die exakten Ergebnisse aus Schalenmodell-Diagonalisierungsverfahren verfügen.

Von den neun Zuständen im Falle $J=0$ erweisen sich drei als linear abhängig. Die verbleibenden sechs zeigen den in Abb.9 aufgetragenen Konvergenzverlauf. Dabei haben wir die höherliegenden Zustände $E_{J=0} \gg -120$ MEV in der Zeichnung weggelassen. Die geploteten Werte zeigen eine gute Konvergenz zum ersten angeregten Zustand und ein etwas langsames Konvergenzverhalten zum 0^+ -Grundzustand. Für den zweiten angeregten Zustand bedarf es noch einer Erweiterung des Konfigurationsraumes auf mehr linear unabhängige Zustände. Daß der erste angeregte Zustand rascher konvergiert als der Grundzustand liegt daran, daß die beiden nächsten wichtigen Basiszustände, die in der Rangordnung der Variationsenergie folgen, wesentlich stärker mit dem zweiten als dem tiefsten Zustand mischen. Um den 0^+ -Zustand besser zu reproduzieren, müßte der Konfigurationsraum noch um einige linear unabhängige Zustände erweitert werden. Trotzdem zeigt dieses Ergebnis ganz deutlich, daß die Hartree-Fock-Gleichungen - im Sinne unseres Verfahrens benutzt - in der Lage sind, die tiefliegenden exakten Zustände zu approximieren. Vergleiche mit anderen Methoden für den Grundzustand findet man in Ref.25.

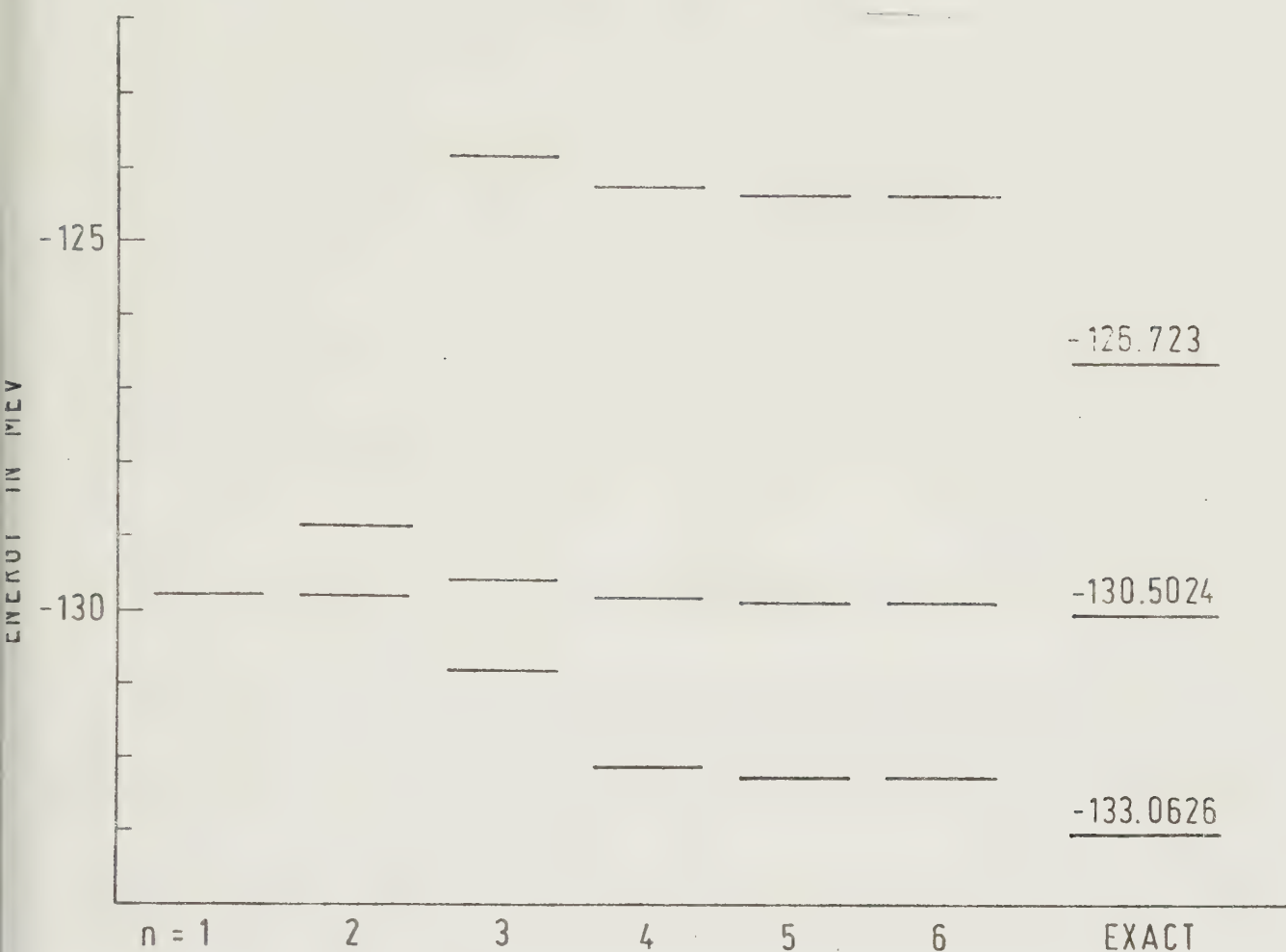


Abb. 9 Konvergenzdiagramm der linear unabhängigen $J=0$ Zustände in der PAV-HF-Basis in ^{28}Si im Vergleich mit den exakten Ergebnissen der Schalenmodell-Diagonalisation. n ist die Anzahl der auf Drehimpulseigenzustände projizierten $J=0$ Basiszuständen des Konfigurationsraumes, die benutzt werden, den Hamilton-Operator zu diagonalisieren.

Die Diskrepanz zwischen Experiment und Theorie wird gerade in den CM-Rechnungen - durch das Aufweiten der Leveldistanz zwischen tiefsten und ersten angeregten Zustand von ungefähr 1MeV ($n=2$, Abb.9) auf über 2MeV ($n=6$, Abb.9) aufgehoben. Damit bestätigt sich erstens, daß sich auch mit dem Hartree-Fock-Grundzustands-
gleichungen ohne eine zusätzliche Orthogonalitätsbe-
dingung eine vernünftige Basis erzeugen läßt und zweitens, daß die höher energetischen Konfigurationen in den CM-Rechnungen dem Problem entsprechend gewichtet werden. Die Basiszustände, die sich das System in den HF-Lösungen aussucht, sind gerade die gewichtigsten Konfigurationen.

Tabelle 3

J	0	2	4	6	8	10	12
H_J^{11} [MEV]	-.102+02	-.404+02	-.417+02	-.244+02	-.866+01	-.175+01	-.155+00
H_J^{22} [MEV]	-.819+01	-.339+02	-.394+02	-.278+02	-.129+02	-.377+01	-.546+00
H_J^{12} [MEV]	-.743-01	.654-02	.172+00	-.108+00	-.288-01	.437-01	-.106-01

Tab. 3 Tabelliert sind die Diagonal- und off-Diagonalelemente der Hamilton-Matrix der beiden energetisch tiefsten HF-Basiszustände in ^{28}Si .

V. Zusammenfassung und Ausblick.

Wir haben in dieser Arbeit CM-Rechnungen durchgeführt, die in der Lage sind, systematisch die Eigenzustände des niedrig-liegenden Eigenwertspektrums von Kernen zu beschreiben.

Die Methode besteht darin, daß der Konfigurationsraum aus Lösungen der Variationsgleichungen aufgebaut wird. Ihre Stärke besteht darin, daß

- die CM-Rechnungen auf große Vielteilchensysteme ausgedehnt werden können
- sich der Modellraum, in dem die Variationsgleichungen gelöst werden, einfach erweitern läßt
- die Dynamik des Vielteilchensystems selbst die Auswahl der Konfigurationen trifft und keine a priori Auswahl der "wichtigsten" Konfigurationen getroffen werden muß
- für spezielle Probleme geeignete Variationsgleichungen im Verfahren benutzt werden können.

Am Beispiel ^{20}Ne haben wir verschiedene Variationsgleichungen zur Erzeugung des Basissatzes herangezogen und CM-Rechnungen durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen eine kaum unterscheidbare aber leicht bessere Konvergenz der EHF-Basis, die mit ihrer Orthogonalitätsbedingung bewirkt, daß die Diagonalelemente in der Hamilton-Matrix dominieren. Dieser leichte Vorteil wird durch den rechen-

technischen Aufwand, die Orthogonalitätsbedingung in größeren Konfigurationsräumen gleichzeitig mit den Variationsgleichungen erfüllen zu müssen, nicht nur aufgehoben, sondern wirkt sich eher nachteilig aus. Die HF-Gleichungen bieten eine einfachere Möglichkeit den Konfigurationsraum zu erzeugen, ohne einen gravierenden Nachteil gegenüber den EHF-Gleichungen zu präsentieren. Im Konvergenzverhalten dieser beiden Basissätze ist in ^{20}Ne , soweit dieses kleine Vielteilchenproblem überhaupt einen Vergleich zuläßt, kaum ein Unterschied festzustellen. Erfreulich ist das Ergebnis in ^{28}Si , das noch einmal untermauert, wie wichtig es ist, erstens über die Lösungen von Variationsgleichungen Eigenschaften des Vielteilchensystems in den Konfigurationsraum einzubringen - die richtige Auswahl der wichtigen Konfigurationen trifft das System selbst - und zweitens die Bedeutung der Beimischungen von energetisch höher gelegenen Konfigurationen, die gerade in ^{28}Si anschaulich bewirken, daß die beiden ersten Zustände abgesenkt und von ungefähr 0.8 auf über 2 MeV auseinandergetrieben werden.

Eine weitere rechnungsvereinfachende Methode hat sich in den CHF-Gleichungen erfüllt. Durch die Drehimpulszwangsbedingung werden bevorzugt Lösungen erzeugt, die eine gewünschte J-Komponente betonen, so daß nach der Projektion auf Eigenzustände von J eine in J gewichtete Basis entsteht, die bereits mehr Information in J enthält und man deshalb in den CM-Rechnungen

mit weniger Zuständen eine gute Konvergenz gegen das exakte Eigenwertspektrum erreichen kann. Die Konzentration auf der gewünschten Drehimpulskomponente J in der CHF-Basis reicht sogar aus, um CM-Rechnungen ohne zusätzliche Drehimpulsprojektion durchführen zu können, die bereits eine verblüffend gute approximative Beschreibung der Niveauverteilung zwischen verschiedenen J^+ -Zuständen liefert.

Bis auf die CM-Rechnungen der CHF-Basis ohne zusätzliche Drehimpulsprojektion, müssen zur Erzeugung des Konfigurationsraumes in den Eigenzuständen zum Drehimpulsoperator $\hat{J}$ immer erst die Matrixelemente $P_J^{nm} = \langle \phi_n | \hat{P}^J | \phi_m \rangle$ und $E_J^{nm} = \langle \phi_n | \hat{H} \hat{P}^J | \phi_m \rangle$ berechnet werden, was sich in größeren Konfigurationsräumen als sehr aufwendig erweist. Besonders die Matrixelemente E_J^{nm} bereiten große Schwierigkeiten. Die Untersuchungen in ^{20}Ne zeigen zwar, daß man, um einen ersten Überblick zu bekommen, die CM-CHF-Rechnungen ohne Drehimpulsprojektionen durchführen kann, aber um Eigenzustände zu bestimmen (Konfigurationsraum), mit denen man anschließend verschiedene Kerngrößen, z.B. elektromagnetische Momente, berechnen möchte, muß man sich höchst wahrscheinlich auf die PAV-CHF-Basis oder - wie in ^{28}Si erfolgreich benutzt - die PAV-CHF-Basis konzentrieren. Dafür sind aber zur Restaurierung der Drehimpulssymmetrie, Drehimpulsprojektionen erforderlich. In Kap.III.3. haben wir zwei Methoden zur approximativen Drehimpulsprojektion, die

sich auf axialsymmetrische Zustände anwenden lassen ²⁰⁾,
 vorgestellt. Grundlage für die Gültigkeit dieser Näher-
 ungen ist die funktionale Ähnlichkeit von $\langle \phi_n | \hat{R}(\beta) | \phi_m \rangle$
 und $\langle \phi_n | \hat{H} \hat{R}(\beta) | \phi_m \rangle$ und der rasche Abfall der beiden
 Matrixelemente für β (β ist der Eulerwinkel der
 Drehung um die $\hat{J}_Y$ -Achse), wenn β sich von null ent-
 fernt. Wir sind in der Lage, die Drehimpulsprojektion
 exakt durchzuführen und haben deshalb das Verhalten
 der Matrixelemente $\langle \phi_n | \hat{R}(\beta) | \phi_m \rangle$, $\langle \phi_n | \hat{H} \hat{R}(\beta) | \phi_m \rangle$
 in Beispielen untersucht. In Abbn. 10a, 10b, 10c ist
 deren Verhalten für axialsymmetrische Zustände (10a),
 auf Eigenzustände von $\hat{J}_Z$ mit $K=0$ projizierte Zu-
 stände (10b) und die off-diagonalen Matrixelemente
 $\langle \phi_n | \hat{R}(\beta) | \phi_m \rangle$ und $\langle \phi_n | \hat{H} \hat{R}(\beta) | \phi_m \rangle$ ($n \neq m$) (10c) aus der
²⁰Ne-Basis aufgetragen. In den Abbn. 11a, 11b, 11c
 sind diese Matrixelemente mit den selben Eigenschaften
 der Zustände in der selben Reihenfolge für ²⁸Si aufge-
 tragen.

Dabei zeigt sich, daß der Verlauf von $\langle \phi_n | \hat{R}(\beta) | \phi_m \rangle$
 und $\langle \phi_n | \hat{H} \hat{R}(\beta) | \phi_m \rangle$ im kleineren System ²⁰Ne ein gleich-
 mäßig ähnliches Verhalten zeigt, daß kaum Abweichungen
 besitzt, so daß hierfür Näherungsverfahren berechnete
 Hoffnungen besitzen. In ²⁸Si (Abbn. 11a, 11b, 11c)
 sieht es hingegen anders aus. Während für den axial-
 symmetrischen Zustand (Abb. 11a) eine Näherung von
 $\langle \phi_n | \hat{H} \hat{R}(\beta) | \phi_n \rangle$ durch ein Polynom in β , dessen Ge-
 stalt sich aus $\langle \phi_n | \hat{R}(\beta) | \phi_n \rangle$ bestimmt, möglich ist,
 zeigt der $K=0$ -projizierte Zustand (Abb. 11b) bereits
 ein abweichendes Verhalten in $\left\{ \begin{array}{l} \langle \phi_m | \hat{R}(\beta) | \phi_m \rangle \\ \langle \phi_m | \hat{H} \hat{R}(\beta) | \phi_m \rangle \end{array} \right\}$ sowohl

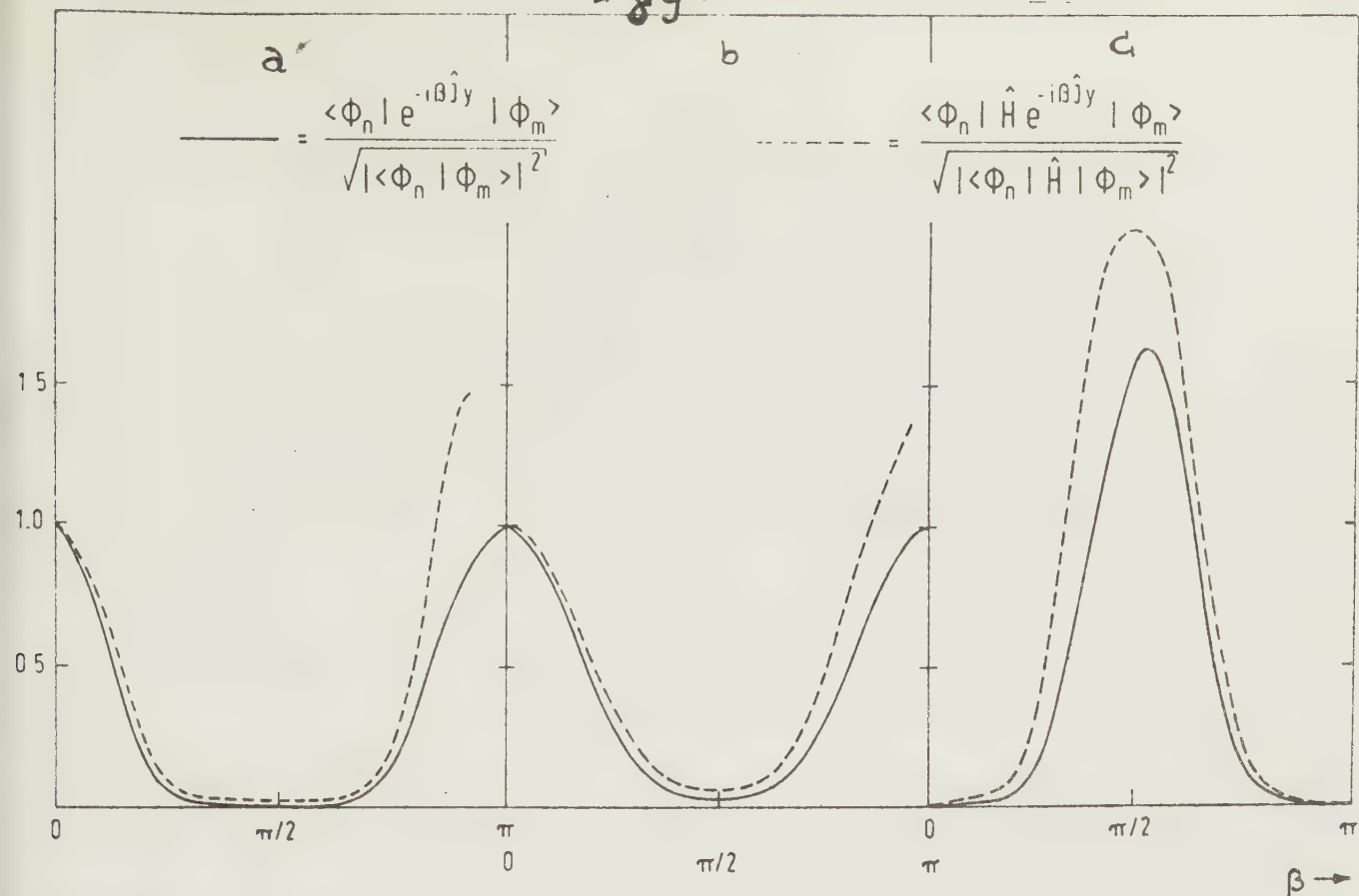


Abb. 10a, b, c

Gezeigt wird der Verlauf der normierten Matrixelemente $\langle \phi_i | \hat{e}(\beta) | \phi_k \rangle$ und $\langle \phi_i | \hat{H} \hat{e}(\beta) | \phi_k \rangle$ als Funktion des Euler-Winkels β im Falle ^{20}Ne . In Abb. 10a ist der achsialsymmetrische Zustand mit sich selbst ($i=k=1$), in Abb. 10b der nicht-achsialsymmetrische mit sich selbst ($i=k=2$) und in Abb. 10c die off-Diagonalelemente aus achsialsymmetrischem Zustand ($i=1$) und nicht-achsialsymmetrischem Zustand ($k=2$) aufgetragen.

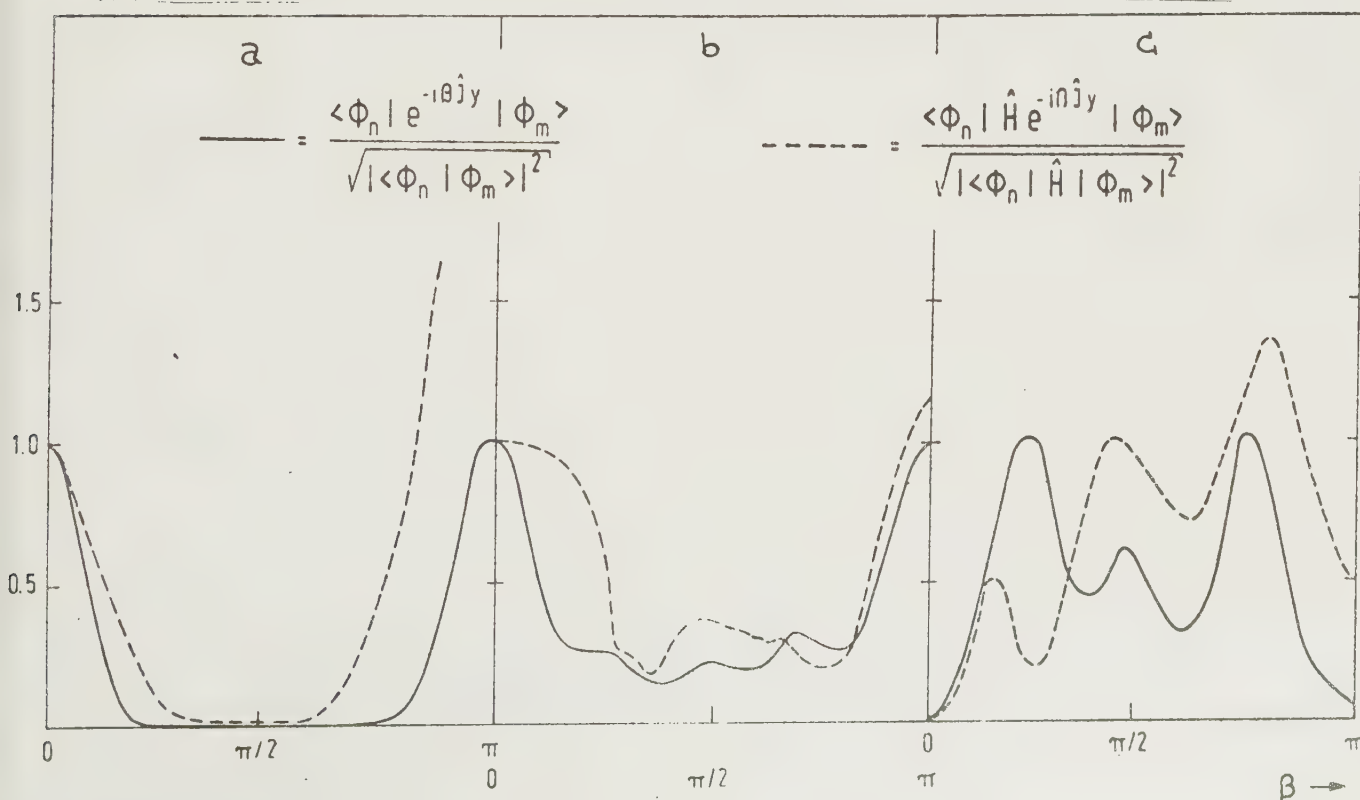


Abb. 11a, b, c

Gezeigt wird der Verlauf der normierten Matrixelemente

$$\langle \phi_i | \hat{Q}(\beta) | \phi_k \rangle \quad \text{und} \quad \langle \phi_i | \hat{H} \hat{Q}(\beta) | \phi_k \rangle$$

als Funktion des Euler-Winkel β im Falle ^{28}Si . In Abb 11a ist der achsialsymmetrische Zustand mit sich selbst ($i=k=1$), in Abb. 11b der nicht-achsialsymmetrische mit sich selbst ($i=k=2$) und in Abb. 11c die off-Diagonalelemente aus achsial-symmetrischem Zustand ($i=1$) und nicht-achsialsymmetrischem Zustand ($k=2$) aufgetragen.

in ihrem Abfall $0 < \beta \leq \frac{\pi}{4}$ als auch in ihrem funktionalen Verlauf im unteren Bereich der Kurven $(\frac{\pi}{4} < \beta < 3\frac{\pi}{4})$. Da zum Beispiel die Kamlah-Näherung (III.3.) einen Term beinhaltet, der die Distanz der beiden Kurven berücksichtigt ²⁰⁾, ist es durchaus möglich, auch für diesen Fall eine akzeptable Näherung zu finden und zwar deshalb, weil die Beiträge beider Matrixelemente in dem unregelmäßigen Bereich $\frac{\pi}{4} < \beta < 3\frac{\pi}{4}$ relativ klein sind im Vergleich mit der Umgebung von $\beta=0$ und $\beta=\pi$.

Die gemischten Zustände hingegen (Abb.11c), scheinen nur sehr schwer durch Näherungen darstellbar zu sein. Der qualitative Verlauf der beiden Kurven stimmt zwar noch überein, aber die Amplituden sind unterschiedlich groß und zum Teil stark gegeneinander verschoben.

Wir haben diese Betrachtungen über genäherte Drehimpulsprojektionen mit in diesen Teil der Arbeit aufgenommen, weil sie für zukünftige Rechnungen eine gewichtige Rolle spielen. Bisher waren wir in der Lage, die Projektion auf Drehimpulseigenzustände exakt durchzuführen. Mit unseren Drehimpulsprojektionsprogrammen ließen sich

auch noch beträchtlich größere Vielteilchenprobleme in größeren Konfigurationsräumen und erweiterten Modellräumen berechnen, wenn die Basiszustände alle Axialsymmetrie besäßen. Da wir aber beliebige Zustände als Lösungen der Variationsgleichungen zulassen, dürfte die exakte Drehimpulsprojektionsmethode spätestens in no-core ^{16}O -Rechnungen durch die s-d-Schale erschöpft sein. Andererseits bietet die ausgezeichnete Genauigkeit aller beteiligter Programme vielschichtige Möglichkeiten für eine systematische Untersuchung verschiedener Kernkräfte und der Kernstruktur in diesem Bereich.

Als nächster Schritt ist vorgesehen, no-core CM-Rechnungen in ^{12}C und ^{16}O mit G-Matrixelementen durchzuführen, die elektromagnetischen Kernmomente zu berechnen und sie mit dem Experiment zu vergleichen. Außer auf Übereinstimmungen der theoretischen vorhergesagten Ergebnisse mit dem Experiment, sollten auch vergleichende Untersuchungen der Beiträge des Cores, - der bisher immer als unbeteiligt in der Variation angesehen wurde, im Mittelpunkt zukünftiger Rechnungen stehen.

Ein anderes Problem taucht auf durch die Schwerpunktsbewegung, die in Schalenmodellldiagonalisierungsverfahren zu spuriosen Zuständen führt und die nur sehr schwierig in Variationsverfahren ²⁰⁾ behandelt werden kann.

Eine systematische Methode, die das spuriose Schwerpunktsproblem in einer dynamisch determinierten Basis behandelt, ²⁶⁾ bietet sich unserem Verfahren als ein praktikabler Vorschlag an.

A I) Das Matrixelement $\langle \psi(\kappa) | \hat{R}(\beta) | \psi(\kappa) \rangle$

In der Drehimpulsprojektion (III.3.) sind die Matrixelemente von $\hat{R}(\beta) := e^{-i\beta \hat{J}_y}$

$$m(\beta) := \langle \psi(\kappa) | \hat{R}(\beta) | \psi(\kappa) \rangle \quad (1)$$

$$h(\beta) := \langle \psi(\kappa) | \hat{H} \hat{R}(\beta) | \psi(\kappa) \rangle \quad (2)$$

zu berechnen. Dabei sind die Zustände $|\psi(\kappa)\rangle$ Zustände mit axialer Symmetrie oder die auf Eigenzustände von $\hat{J}_z$ projizierten Zustände.

In der Entwicklung nach Orbitalen

$$|\psi\rangle = |\lambda_1\rangle \otimes |\lambda_2\rangle \otimes \dots \otimes |\lambda_n\rangle \quad (3)$$

mit

$$|\lambda\rangle = \sum_{f m} c_{f m}^{\lambda} |f m\rangle \quad (4)$$

tragen im Falle der "nur" projizierten Zustände

$$|\psi(\kappa)\rangle = \sum_{\left\{ \begin{matrix} f_1 m_1 \\ f_2 m_2 \\ \vdots \\ f_n m_n \end{matrix} \right\}} c_{f_1 m_1}^{\lambda_1} c_{f_2 m_2}^{\lambda_2} \dots c_{f_n m_n}^{\lambda_n} |f_1 m_1\rangle \otimes |f_2 m_2\rangle \dots |f_n m_n\rangle \quad (5)$$

nicht alle Kombinationen der Entwicklungskoeffizienten bei.

Die Klammer $\{ \}$ um die Summationsindizes bedeutet,

daß die Kombinationen der $j_1 m_1 \dots j_A m_A$ eingeschränkt sind durch die Bedingung

$$\sum_{i=1}^A m_i = K$$

$\hat{R}(\beta)$ angewandt auf $|\psi(K)\rangle$ in der Entwicklung (5) führt zu dem zusätzlichen Produkt von A kleinen Drehmatrizen in

$$\begin{aligned} \hat{R}(\beta) |\psi(K)\rangle &= \\ &= \sum_{\substack{j_1 m_1 m'_1 \\ j_2 m_2 m'_2 \\ \vdots \\ j_A m_A m'_A \\ \sum_{i=1}^A m_i = K}} C_{j_1 m_1}^{\lambda_1} C_{j_2 m_2}^{\lambda_2} \dots C_{j_A m_A}^{\lambda_A} d_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\beta) \dots d_{m_A m'_A}^{(j_A)}(\beta) |j_1 m'_1\rangle \otimes \dots |j_A m'_A\rangle \quad (5') \end{aligned}$$

Damit ergeben sich

$$\begin{aligned} \langle \psi(K) | \hat{R}(\beta) | \psi(K) \rangle &= \\ &= \sum_{\substack{j_1 m_1 \\ j_2 m_2 \\ \vdots \\ j_A m_A}} \sum_{\substack{j'_1 m'_1 \\ j'_2 m'_2 \\ \vdots \\ j'_A m'_A}} \det \{ C_{j_\nu m_\nu}^{\lambda_\nu *} C_{j'_\mu m'_\mu}^{\lambda_\mu} d_{m_\nu m'_\mu}^{(j_\nu)}(\beta) \delta_{j_\nu j'_\mu} \} \quad (6) \end{aligned}$$

die Summationen über die Determinanten mit den Elementen

$$A_{\nu\mu} = C_{j_\nu m_\nu}^{\lambda_\nu *} C_{j'_\mu m'_\mu}^{\lambda_\mu} d_{m_\nu m'_\mu}^{(j_\nu)}(\beta) \quad (7)$$

in der Schalenmodellbasis. Die Summation läßt sich nur dann in die Elemente $A_{\nu\mu}$ übertragen

$$A_{\nu\mu} := \langle \nu | \mu \rangle = \sum_{j_\nu m_\nu m'_\mu} C_{j_\nu m_\nu}^{\lambda_\nu} C_{j_\mu m'_\mu}^{\lambda_\mu} d_{m_\nu m_\mu}^{j_\nu(\beta)} \quad (8)$$

wenn die Kombinationen $(j_1 m_1 \dots j_A m_A; j'_1 m'_1 \dots j'_A m'_A)$ alle beitragen, d.h. $|\psi(\kappa)\rangle$ bereits ein axialsymmetrischer Zustand ist.

A II) Die Matrixelemente von $\langle \psi(\kappa) | \hat{H} \hat{R}(\beta) | \psi(\kappa) \rangle$

Der Kern-Hamilton-Operator $\hat{H}$ hat in der zweiten Quantisierung geschrieben die Form

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{ik} \langle i | t | k \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{4} \sum_{ikln} \langle i k | v | l n \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_l \quad (9)$$

mit dem Erzeugungsoperator

$$\hat{a}_i^\dagger |0\rangle = |j_i m_i\rangle \quad (10)$$

der einen Schalenmodellzustand $|j_i m_i\rangle$ erzeugt und dem Vakuumzustand $|0\rangle$, der das teilchenfreie Vakuum bedeutet.

Der Einteilchenenergieanteil von $\hat{H}$ in (9)

$$\hat{T} := \frac{1}{2} \sum_{ik} \epsilon_{ik} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k \quad (11)$$

- ϵ_{ik} sind die Einteilchenenergien

$$\varepsilon_{ik} = \langle f_i m_i | t | f_k m_k \rangle \delta_{ik} \quad (12)$$

- bewirkt mit $\hat{a}_i^+ \hat{a}_k$ gerade, daß in der Determinanten (6) die i-te Zeile und die k-te Spalte gelöscht werden und nur deren Kreuzungselement stehen bleibt.

$$\begin{aligned} \langle \psi(k) | \hat{T} \hat{R}(\beta) | \psi(k) \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\left\{ \begin{smallmatrix} f_1 m_1 \\ f_2 m_2 \\ \vdots \\ f_A m_A \end{smallmatrix} \right\}} \sum_{\left\{ \begin{smallmatrix} f'_1 m'_1 \\ f'_2 m'_2 \\ \vdots \\ f'_A m'_A \end{smallmatrix} \right\}} \sum_{i,k} c_{f_i m_i}^{\lambda_i^*} c_{f'_k m'_k}^{\lambda_k} d_{m_i m'_k}^{f_i(\beta)} M^{(1)}(i,k) \end{aligned} \quad (13)$$

$M^{(1)}(i,k)$ ist der Minor erster Ordnung der Determinante $\det \{A_{\nu\mu}\}$, die aus den Elementen $A_{\nu\mu}$ (7) besteht, der durch Streichen der i-ten Zeile und k-ten Spalte entsteht.

Die Zweiteilchenwechselwirkung

$$\hat{V} := \frac{1}{4} \sum_{ikln} v_{ikln} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_n \hat{a}_l \quad (14)$$

- die v_{ikln} sind die antisymmetrischen Zweiteilchenmatrixelemente

$$\begin{aligned} v_{ikln} &= \langle f_i m_i \tau_i f_k m_k \tau_k | v | f_n m_n \tau_n f_l m_l \tau_l \rangle \\ &= - \langle f_i m_i \tau_i f_k m_k \tau_k | v | f_n m_n \tau_n f_l m_l \tau_l \rangle \end{aligned} \quad (15)$$

- bewirkt mit ihrer Anordnung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, daß in der Determinanten (6) zwei Zeilen und zwei Spalten gelöscht werden und nur deren Unterdeterminante, die durch Streichen der vier Kreuzungen entstehen, erhalten bleiben

$$\begin{aligned}
 & \langle \psi(k) | \hat{V} \hat{Q}(\beta) | \psi(k) \rangle = \\
 & = \frac{1}{4} \sum_{\substack{(f_1 m_1) \\ (f_2 m_2) \\ \vdots \\ (f_A m_A)}} \sum_{\substack{(f'_1 m'_1) \\ (f'_2 m'_2) \\ \vdots \\ (f'_A m'_A)}} \sum_{i, k, l, n} C_{f_1 m_1}^{\lambda_i^*} C_{f_2 m_2}^{\lambda_k^*} C_{f'_1 m'_1}^{\lambda_l} C_{f'_2 m'_2}^{\lambda_n} d_{m_1 m'_1}^{f_i(\beta)} d_{m_2 m'_2}^{f_k(\beta)} \cdot \\
 & \quad \cdot M^{(2)}(i, k; l, n) \quad (16)
 \end{aligned}$$

$M^{(2)}(i, k; l, n)$ ist der Minor zweiter Ordnung der Determinante $\det \{A_{\nu\mu}\}$, die aus den Elementen $A_{\nu\mu}$ (7) besteht und der durch Streichen der i-ten und k-ten Zeile und der l-ten und n-ten Spalte entsteht.

Zur Berechnung der Minoren $M^{(2)}(i, k; l, n)$ benutzen wir die Inverse der Matrix $M(A_{\nu\mu})$, die aus den Elementen $A_{\nu\mu}$ (7) besteht. Daraus ergibt sich der Minor erster Ordnung

$$M^{(1)}(i, k) = M^{-1}(A_{\nu\mu}) \cdot \det \{M(A_{\nu\mu})\} \quad (17)$$

und für den Doppelminor

$$M^{(2)}(i, k; e, n) = \frac{M^{(1)}(i, e) \cdot M^{(1)}(k, n) - M^{(1)}(i, n) \cdot M^{(1)}(k, e)}{\det \{ M(A_{\nu\mu}) \}} \quad (18)$$

vorausgesetzt, die Matrix $M(A_{\nu\mu})$ ist nicht singulär, so daß sich ihre Inverse $M^{-1}(A_{\nu\mu})$ immer konstruieren läßt.

A II). Rechnungsvereinfachende Überlegungen

Die Einteilchenanteile sind diagonal in der Isospinkomponente, das heißt, bei angenommener Isospinsymmetrie genügt es, einen Nukleonenanteil zu berechnen und das Ergebnis mit dem Faktor zwei zu versehen.

Anders gelagert ist der Fall in der Zweiteilchenwechselwirkung, wo die Isospinkombinationen $M_T = 0$, die p-n-Anteile, zur Wechselwirkung beitragen. Deshalb ist es für die numerischen Rechnungen besonders wichtig, verfahrensvereinfachende Techniken auszuarbeiten.

Die Zweiteilchenmatrixelemente sind durch das Wigner-Eckart-Theorem definiert durch

$$\begin{aligned} & \langle f i m_i \tau_i | \hat{R}(\beta) | f' e' m'_e \tau'_e \rangle = \\ & = \sum_{m''_e m''_i} \sum_{J H J' H'} C_{m_i m_k}^{f i g k J} C_{m'_e m'_h}^{f' e' g' k' J'} f(T_1, H_T) d_{m''_e m'_e}^{f' e'(\beta)} d_{m''_h m'_h}^{f' h'(\beta)} \\ & \cdot \langle f i g k || 0 || f' e' g' k' \rangle_{J T} \delta_{J J'} \end{aligned} \quad (19)$$

die $C_{m_1 m_2}^{j_1 j_2 j}$ sind die Clebsch-Gordan-Koeffizienten und die Funktionen $f(T_I M_T)$ sind die Isospin-Clebsch-Gordan Koeffizienten

$$f(T_I, M_T) = C_{\tau_1 \tau_2 M_T}^{1/2 1/2 T} C_{\tau'_2 \tau'_1 M_T}^{1/2 1/2 T} \quad (20)$$

$\langle f_1 f_2 || 0 || f'_1 f'_2 \rangle_{JT}$ ist das doppelt reduzierte Matrixelement.

Es ist

$$\sum_{m_1'' m_2''} C_{m_1'' m_2'' M}^{j_1 j_2 J} d_{m_2'' m_2'}^{j_2(\beta)} d_{m_1'' m_1'}^{j_1(\beta)} = C_{m_1' m_2' M}^{j_1 j_2 J} d_{M M'}^J(\beta) \quad (21)$$

und da die Wechselwirkung $\hat{V}$ die M-Quantenzahlen unverändert läßt, gilt:

$$\begin{aligned} & \langle f_1 m_1 \tau_1 f_2 m_2 \tau_2 | 0 | f'_1 m_1 \tau_1 f'_2 m_2 \tau_2 \rangle = \\ & = \sum_{M''} \sum_{\substack{T M J' M' \\ T M_T}} C_{m_1 m_2 M}^{j_1 j_2 J} C_{m_1' m_2' M'}^{j_1' j_2' J'} d_{M'' M'}^J(\beta) \langle f_1 f_2 || 0 || f'_1 f'_2 \rangle_{JT} \cdot \delta_{M'' M} \end{aligned} \quad (21)$$

worin die Doppelsummation über m_1'', m_2'' durch die Werte $m_1' + m_2' = M$ zu ersetzen sind (M, M' ganzzahlig).

Die Zweiteilchenmatrixelemente lassen sich entsprechend der Wechselwirkung aufteilen in ihre M_T -Anteile (t_3 -Kompo-

nente des Isospins) in eine Summe über die Neutron-Neutron-Anteile ($M_T = -1$), Proton-Proton-Anteile ($M_T = 1$) und einen gemischten Term von Neutron-Proton-Anteilen ($M_T = 0$).

$$\begin{aligned}
 & \sum_{T, M_T} f(T, M_T) \langle f_i f_k \| U \| f_e f_n \rangle_{J_T} = \\
 & = \underbrace{\left\{ \left[C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}^{-\frac{1}{2} -\frac{1}{2} -1} \right]^2 + \left[C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}^{-\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0} \right]^2 + \left[C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1} \right]^2 \right\} \langle f_i f_k \| U \| f_e f_n \rangle_{J_1}}_{\text{Isovektorische Teil}} \\
 & + \underbrace{\left[C_{\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0}^{-\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0} \right]^2 \langle f_i f_k \| U \| f_e f_n \rangle_{J_0}}_{\text{Isoskalare Teil}} \\
 & = \frac{1}{2} \left[\langle f_i f_k \| U \| f_e f_n \rangle_{J_1} + \langle f_i f_k \| U \| f_e f_n \rangle_{J_0} \right] \\
 & + \underbrace{\langle f_i f_k \| U \| f_e f_n \rangle_{J_1}}_{M_T = -1} + \underbrace{\langle f_i f_k \| U \| f_e f_n \rangle_{J_1}}_{M_T = 1}
 \end{aligned}$$

Sind die Zustände isospinsymmetrisch, so entsprechen die ($M_T = 1$)-Anteile den ($M_T = -1$)-Anteilen auch in den Entwicklungskoeffizienten, die Überlappdeterminante blockt in einen Neutronen- und einen Protonen-Block und es genügt, anstatt mit der A-Teilchen Determinante nur mit Determinanten der Dimension $\left(\frac{A}{2}\right)^2$ zu arbeiten.

Literatur:

- 1) E.C. Halbert, J.B. McGrory, B.H. Wiedenthal, and S.P. Pandya in: Advances in Nuclear Physics (Vol.4), eds. M. Baranger and E. Vogt, pp New York: Plenum Press
- 2) G. Ripka: Advances in Nuclear Physics (Vol.1), 1st ed., pp 183-257, New York: Plenum Press
- 3) H.D. Zeh, Z. Physik 202 (1967), p 38;
H.D. Zeh, Z. Physik 188 (1965), p 361-373
- 4) R. Dreizler, P. Federman, B. Giraud, and E. Osnes, Nucl. Phys. A113 (1968), p 145-160
- 5) H.J. Mang, Physics Reports: Physics Lett. C, 18, 6 (1975), p 325-368
- 6) A. Faessler and A. Plastino, Z. Physik A278 (1969), p 88
- 7) A. Kelemen and R. Dreizler, Z. Physik A278 (1976), p 269;
McDonald, N., Adv. Phys. 19 (1970), p 371;
J. Raynal, J. Phys. Rad. 31, (1970), p 3
- 8) G.E. Brown, Unified Theory of Nuclear Models and Forces (North Holland Pub. Co., Amsterdam, 1967) VI ;
G.E. Brown and A.M. Green, Nucl. Phys. 75 (1966), p 401
- 9) H.G. Miller, R. Dreizler, and G. Do Dang, Phys. Lett. Vol. 77b (1978), p 119
- 10) J.P. Elliot and J.A. Evans, Nucl. Phys. A324 (1979), p 12;
M.L. Cambiaggio, A. Plastino, and L. Szybisy, Nucl. Phys. A344 (1978), p 233

- 11) P.O. Löwdin, Phys. Rev. 97 (1955), p 1474;
Adv. Phys. 5 (1956), p 1
- 12) D.L. Hill, J.A. Wheeler, Phys. Rev. 89 (1953), p 1106
- 13) A. Kelemen and R. Dreizler, Z. Physik A278 (1976), p 269
- 14) R.Y. Cusson and H.C. Lee, Nucl. Phys. A211 (1973), p 429
- 15) P. Chattopadhyay, Z. Physik A292 (1979), p 61
- 16) A.R. Edmonds, Drehimpulse in der Quantenmechanik,
B I (1964)
- 17) A.J. Glen and McDonald, N., Nucl. Phys. A165 (1971),
p 524;
F. Villars, Varenna Lectures, course 36 (Academic Press,
1966), p 4
- 18) McDonald, N., Adv. Phys. 19 (1970), p 371
- 19) H.A. Lamme, E. Boeker, Nucl. Phys. A111 (1968), p 492;
Nucl. Phys. A136 (1969), p 609;
P. Chattopadhyay and R. Dreizler, Nucl Phys. A321 (1979),
p 62;
N. Onishi and R.K. Sheline, Phys. Rev. C2 (1979), p 1304
- 20) A. Kamlah, Z. Physik 216 (1968), p 52
- 21) M.H. Macfarlane and A.P. Shukla, Phys. Lett. 35B (1971),
p 11
- 22) H.G. Miller and H.P. Schröder , submitted to Nucl. Phys.
- 23) H.G. Miller and H.P. Schröder , submitted to Nucl. Phys.
- 24) H.G. Miller and H.P. Schröder, submitted to Phys. Rev.
Letters
- 25) R. Shanker, Z. Phys. A288 (1978), p 297
- 26) H.G. Miller and J.P. Vary, to be published in Phys. Rev. C .
- 27) H.G. Miller and H.P. Schröder, submitted to Nucl. Phys.

Meinem Lehrer, Herrn Dozent Dr. H.G. Miller, danke ich an dieser Stelle gerne für dieses Thema, für die Mühe und Arbeit, die er zusammen mit mir in den Aufbau der Computerprogramme gesteckt hat, die das notwendige Instrumentarium zu den vorgelegten Untersuchungen bilden, für seine vielen fruchtbaren Anregungen, die verwirklicht, Eingang in diese Arbeit gefunden haben.

Herrn Prof.Dr. R.M. Dreizler danke ich für die freundliche Aufnahme am Institut und die freizügige Bereitstellung der Ressourcen, die das Institut bietet.

Herrn Prof.Dr. J.B. McGrory danke ich für die eigens für uns erzeugten exakten Ergebnisse des tiefliegenden $J=0$ Spektrums in ^{28}Si .

Für die sorgfältige und rasche Ausführung der vielen Zeichnungen danke ich Frau Boffo und für das genauso sorgfältige und rasche Schreiben dieser Arbeit Frau Pfankuch.

Herrn Brose danke ich für die Drucklegung dieser Arbeit.

Der Studienstiftung des Deutschen Volkes danke ich für die Gewährung eines Doktorandenstipendiums.

Und gerne bedanke ich mich auch beim HRZ der Universität für die großzügig zur Verfügung gestellte Rechenzeit und den ausgezeichneten Service.

LEBENS LAUF

Hans Peter Schröder

Habichtweg 9

6200 Wiesbaden

17.3.1943	geboren in Speyer
1950-1954	Volksschule in Meckenheim/Pfalz
1954-1958	Staatl. naturw. Gymnasium an der Jägerstraße in Ludwigshafen/Rh.
1958-1961	Bäckerlehre
1961	Gehilfenprüfung abgelegt
1964-1968	Abendgymnasium in Darmstadt
1968	Abitur
1968-1970	Physikstudium an der Georg-August-Universität in Göttingen
1970	Diplom-Vorprüfung in Physik
1971-1976	Physikstudium an der Johannes-Gutenberg-Universi- tät in Mainz
1976	Diplomhauptprüfung
1977	Beginn der Doktorarbeit am Institut für Theore- tische Physik der Johann Wolfgang-Goethe-Univer- sität in Frankfurt/Main.

Meine akademischen Lehrer waren:

Göttingen: Borchers, Christian, Dombrowsky,
 Flammersfeld, Glemmser, Günzler,
 Hilsch, Lüders, Maak

Mainz: Arenhövel, Börsch-Supan, Drechsel,
 Ehrenberg, Freitag, Klages, Reichert,
 Sandhas, Schneider, Schubert, Tillmann,
 Walter

Frankfurt/M. Dreizler, Miller.

